

UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE  
PEDAGOGICKÁ FAKULTA  
KATEDRA CHEMIE A DIDAKTIKY CHEMIE

# **RIGORÓZNÍ PRÁCE**

**Molekulární modely ve výuce organické chemie  
na gymnáziu**

**Molecular models in teaching organic chemistry  
at the Grammar School**

PaedDr. Milan Marek, Ph.D.

2013

Prohlašuji, že jsem rigorózní práci vypracoval samostatně, že jsem řádně citoval všechny použité prameny a literaturu a že práce nebyla využita v rámci jiného vysokoškolského studia či k získání jiného nebo stejného titulu.

V Jaroměři dne 28. května 2013.

.....  
PaedDr. Milan Marek, Ph.D.

**NÁZEV:**

Molekulární modely ve výuce organické chemie na gymnáziu

**AUTOR:**

Milan Marek

**KATEDRA:**

Katedra chemie a didaktiky chemie

**ABSTRAKT:**

Rigorózní práce je zaměřena na využití molekulárních modelů ve výuce organické chemie na gymnáziu. Modely jsou určeny k prezentaci struktury organických sloučenin a především jejich chemických vlastností.

Výzkum zahrnuje konstrukci modelů (vycházející z kvantově-chemických metod) vybraných organických sloučenin z kategorie uhlovodíků, halogenderivátů uhlovodíků, kyslíkatých derivátů uhlovodíků a dalších typů sloučenin. K příslušným modelům jsou zpracovány úlohy zaměřené na strukturu a reaktivitu sloučenin. V rámci výzkumu je sledován vliv použití modelů na úspěšnost řešení úloh studenty 3. ročníku gymnázia. Úlohy se vztahují k rozložení elektronových hustot v molekule, delokalizaci elektronů, substitučnímu efektu, typologii reakcí apod. Výzkumu se zúčastnilo celkem 223 respondentů.

Výsledky výzkumu ukázaly na zvýšení úspěšnosti řešení úloh studenty, kteří měli k dispozici molekulární modely, v některých případech až o 26 %. Pozitivní vliv modelů na řešení úloh je individuální, závisí na charakteru daného okruhu problémů.

Výzkum ukázal na nesporný vliv molekulárních modelů pro zkvalitnění výuky, jejich další využívání ve školní praxi lze jen doporučit.

**KLÍČOVÁ SLOVA:**

Molekulární modely, Výuka organické chemie, Gymnázium.

**TITLE:**

Molecular models in teaching organic chemistry at the Grammar School

**AUTHOR:**

Milan Marek

**DEPARTMENT:**

Department of Chemistry and Chemical Education

**ABSTRACT:**

The thesis is focused on the use of molecular models in teaching organic chemistry at the Grammar School. Models are used for a presentation of the structure of organic compounds and especially their chemical characteristics.

The research includes the construction of models (based on quantum-chemical methods), selected organic compounds from the category hydrocarbons, halogenated hydrocarbon and oxytgented derivates of hydrocarbons and other types of compounds. Along with the relevant models, the tasks focusing on the structure and reactivity of compounds are processed. The research examined the influence of the use of models for a success solving task of students from 3rd year of Grammar School. Tasks are related to the distribution of electron density in the molecule, delocalization of electrons substitution effect of typology reaction etc. 223 students participated in this research.

The research results have shown the increase of the success of solving the tasks of those students who could use molecular models, in some cases the increase of 26% has been shown. The positive effect of the models for solving of problems is individual and it depends on the character and specifics of the solved issues.

The research has shown the undeniable influence of molecular models for improving the quality of teaching and their further use in school practise may be only recommended.

**KEYWORDS:**

Molecular models, Teaching organic chemistry, Grammar School.

# Obsah

<b>1</b>	<b>ÚVOD .....</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>SOUČASNÝ STAV ŘEŠENÉ PROBLEMATIKY .....</b>	<b>7</b>
2.1	CHARAKTERISTIKA STRUKTURY CHEMICKÝCH LÁTEK .....	7
2.2	PREZENTACE STRUKTURY CHEMICKÝCH LÁTEK V UČIVU CHEMIE NA GYMNAZIU .....	12
<b>3</b>	<b>CÍL PRÁCE .....</b>	<b>16</b>
<b>4</b>	<b>EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST .....</b>	<b>17</b>
4.1	METODY MOLEKULÁRNÍHO MODELOVÁNÍ .....	17
4.2	CHARAKTERISTIKA SOFTWARE PRO MOLEKULÁRNÍ MODELOVÁNÍ .....	19
4.3	KONSTRUKCE MOLEKULÁRNÍCH MODELŮ VYBRANÝCH CHEMICKÝCH LÁTEK .....	22
4.4	METODY PEDAGOGICKÉHO VÝZKUMU .....	24
4.5	VÝZKUM VYUŽITÍ MOLEKULÁRNÍCH MODELŮ VE VÝUCE CHEMIE NA GYMNAZIU .....	27
4.6	VYHODNOCENÍ PEDAGOGICKÉHO VÝZKUMU .....	29
<b>5</b>	<b>VÝSLEDKY A DISKUSE .....</b>	<b>31</b>
<b>6</b>	<b>ZÁVĚR .....</b>	<b>35</b>
<b>7</b>	<b>LITERATURA .....</b>	<b>36</b>
<b>8</b>	<b>PUBLIKACE A DALŠÍ VÝSTUPY AUTORA VZTAHUJÍCÍ SE K ŘEŠENÉ PROBLEMATICE .....</b>	<b>40</b>
<b>9</b>	<b>SEZNAM OBRÁZKŮ .....</b>	<b>43</b>
<b>10</b>	<b>PŘÍLOHY .....</b>	<b>44</b>
10.1	PŘÍLOHA 1 - PŘEHLED VZORCŮ A MODELŮ .....	45
10.2	PŘÍLOHA 2 - TRANSPARENTY MODELŮ UHLOVODÍKŮ A JEJICH DERIVÁTŮ .....	46
10.3	PŘÍLOHA 3 - MANUÁL K PROGRAMU PC SPARTAN PRO .....	49
10.4	PŘÍLOHA 4 - VÝUKOVÝ CD-ROM .....	56
10.5	PŘÍLOHA 5 - MANUÁL K VÝUKOVÉMU CD-ROMU .....	57
10.6	PŘÍLOHA 6 - VÝSKYT A POJMENOVÁNÍ VZORCŮ A MODELŮ V UČEBNICÍCH .....	58
10.7	PŘÍLOHA 7 - TEST 1 - VÝZKUM 1 .....	59
10.8	PŘÍLOHA 8 - TEST 2 - VÝZKUM 2 .....	64
10.9	PŘÍLOHA 9 - GRAFY - VÝZKUM 1 .....	69
10.10	PŘÍLOHA 10 - GRAFY - VÝZKUM 2 .....	75
10.11	PŘÍLOHA 11 - OCENĚNÍ .....	81

# 1 Úvod

V polovině osmdesátých let se na školách všech stupňů objevily první počítače se záměrem jejich využití ve výuce. Po třiceti letech se v této oblasti situace radikálně změnila. Došlo k významnému rozvoji informačních technologií. Boom počítačů a jejich aplikací zasáhl společnost ve všech složkách jejího fungování, tedy i v oblasti školství. Nejde jen o překotný rozvoj hardwaru (počítače s výkonnými procesory a velkou pamětí), ale i softwaru (složitované programy umožňující provádět ve velmi krátké době obtížné početní operace). Tento vývoj se specifickým způsobem promítá ve výuce přírodních věd, jmenovitě chemie na školách. První programy z osmdesátých let umožňují využití počítačů jako tutorů při procvičování učiva či zkoušení. Na přelomu osmdesátých a devadesátých let se objevují počítače ve školních experimentech z fyziky, chemie a biologie. V druhé polovině devadesátých let je možné se setkat s velmi efektním využitím kvantové chemie pro modelování a simulaci struktury a reaktivity organických sloučenin. Dochází tedy ke zcela kvalitativně nové situaci v chemickém vzdělávání. Počátkem sedmdesátých let se v rámci modernizace výuky chemie prosazují prvky kvantové mechaniky. Toto postupné zavádění kvantové mechaniky do chemie obecné se setkává s nepříznivým ohlasem jak u studentů, tak i pedagogů. Učivo je akceptováno zcela formálně bez znalostí principů kvantové chemie. Vývoj výkonných počítačů a kvalitních programů v tomto směru však umožnil takzvaný „spotřební“ přístup ke kvantové chemii, který souvisí s víceméně pragmatickým využíváním produktů kvantově chemických výpočtů. Tyto pak mohou být využity ve výuce chemie nejen v hodinách tradičního typu, ale také v hodinách seminárních. V této době se objevují první učebnice, které obsahují kvantově chemické modely různých typů. Ve výuce se nejvíce osvědčily modely zvané *property maps*. Jedná se o modely vyjadřující velikost a tvar molekuly umístěné do trojrozměrného prostoru, které vyjadřují určitou vlastnost, například distribuci elektronové hustoty pomocí barevné škály. Takové modely jsou vcelku spontánně přijímány studentskou veřejností a stávají se prostředkem názorné výuky chemie. Tímto momentem se jakýsi pomyslný kruh uzavírá: od abstraktních vlnových funkcí, které vnášejí do hlav studentů nejistotu a zmatek, po barevné modely akceptované na odpovídající úrovni i žáky základních škol. Tato skutečnost vede autora rigorózní práce k hledání cest zaměřených na využití aplikované kvantové chemie ve výuce chemie na základních, středních a vysokých školách.

## 2 Současný stav řešené problematiky

### 2.1 Charakteristika struktury chemických látek [1-5]

#### 2.1.1 Vzorce [1-4]

Chemické vzorce jsou dvourozměrným znázorněním složení a struktury sloučenin. Sestávají ze symbolů prvků obsažených ve sloučenině s přihlédnutím k četnosti atomů a charakteru vzájemných vazeb mezi atomy. Chemické vzorce se rozlišují podle úrovně charakterizace složení a struktury sloučenin na:

1. Stechiometrické (empirické) vzorce

Tyto vzorce vyjadřují, jaké druhy atomů jsou obsaženy ve sloučeninách a jaké je jejich vzájemné relativní zastoupení.

2. Molekulové (sumární, souhrnné) vzorce

Uvedené vzorce vyjadřují, z jakých druhů atomů se sloučeniny skládají a jaké je jejich absolutní zastoupení.

3. Funkční (racionální) vzorce

Jde o vzorce vyjadřující jednotlivé charakteristické skupiny v molekulách.

4. Strukturní vzorce

Popisují vzájemné vazby atomů ve sloučeninách a jejich prostorové uspořádání. Strukturní vzorce se dělí na konstituční, konfigurační a konformační.

#### 2.1.2 Modely materiální [4-5]

Ve výuce chemie dochází k významnému uplatnění trojrozměrných modelů molekul. Tyto modely jsou z didaktického hlediska výhodné tím, že hmatatelně ztvárňují představy o struktuře látek. K nejčastějším modelům znázorňujícím strukturu molekul patří:

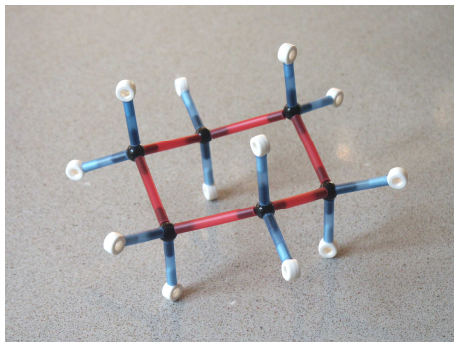
1. modely molekul
2. modely krystalových struktur

#### Modely molekul

Modely molekul můžeme rozdělit na několik základních druhů:

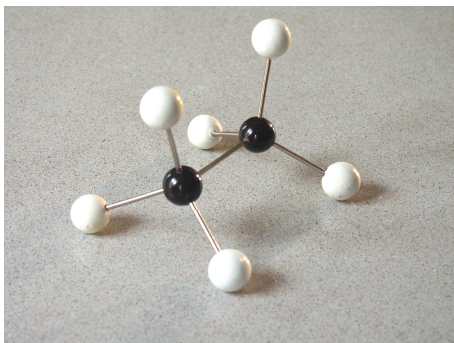
- trubičkové
- kuličkové
- kalotové

**Trubičkové modely** znázorňují molekuly pomocí fragmentů, které představují atomy, a trubiček, které symbolizují vazby. Fragmenty se liší velikostí a barvou, trubičky barvou a délkou. Modely jsou vhodné k prezentaci konformací molekul (obr. 1).



**obr. 1 - Trubičkový model molekuly cyklohexanu**

V **kuličkových modelech** jsou atomy znázorněny kuličkami různé velikosti a odlišné barvy podle druhů atomů prvků. Vazby jsou znázorněny tyčinkami spojujícími jednotlivé kuličky. Mají odpovídající délku a svírají určitý úhel. Pro znázornění násobných vazeb se používají dvě nebo tři tyčinky. Výhodou kuličkových modelů je možnost znázornění prostorového uspořádání atomů v molekule a vytvoření si představy o jednotlivých vazbách (vazebných délkách i vazebných úhlech). Jejich nevýhodou je, že zkreslují představu o skutečných rozměrech atomů a někdy proporcionalitu těchto rozměrů (obr. 2).



**obr. 2 - Kuličkový model molekuly ethanu**

V **kalotových modelech** jsou atomy znázorněny jako kuličky odpovídajících velikostí a kovalentní vazba mezi nimi jako průnik dvou kuliček tak, že z kuliček obou vazebných partnerů je seříznut vrchlík (calotte = čepička, vrchlík) a části jsou spojeny. Výhodou těchto modelů je výstižné znázornění celkového tvaru molekuly včetně vyplnění prostoru jednotlivými atomy. Kaloty jsou navrhovány na základě efektivního van der Waalsova poloměru vymezující část prostoru, který atomy zaujímají. Jednotlivé kaloty jsou barevně



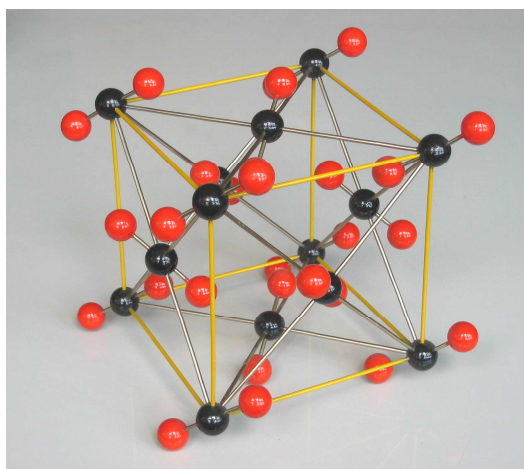
rozlišeny podle typu atomů a jejich hybridního stavu. Barvy jednotlivých atomů jsou: uhlík - černá, vodík - bílá, halogeny - zelená, kyslík - červená, dusík - modrá, síra - žlutá. Kaloty jsou barevně rozlišeny podle násobnosti vazby: uhlík vázaný jednoduchou vazbou je černý, dvojnou vazbou je šedý, kyslík vázaný jednoduchou vazbou je červený, dvojnou vazbou je oranžový apod. Obtížné je vytváření názorných představ o vazebných délkách, úhlech a o deformacích úhlů ve vztahu k hybridizaci atomu uhlíku (obr. 3).



**obr. 3 - Kalotový model molekuly benzenu**

### **Modely krystalových struktur chemických látek**

Tyto modely představují obvykle několik nejjednodušších souborů atomů, molekul nebo iontů, které se pravidelně opakují (elementární rovnoběžnostěny - základní buňky). V modelech jsou atomy (nebo ionty) znázorněny jako kuličky rozlišené podle druhů atomů prvků velikostí i barvou. Kuličky jsou spojovány kovovými tyčinkami bez ohledu na to, zda jde o chemickou vazbu nebo mezimolekulové interakce. Někdy jsou tyčinky rozlišeny barevně (obr. 4).



**obr. 4 - Model krystalové struktury oxidu uhličitého**

### 2.1.3 Modely počítačové [6-24]

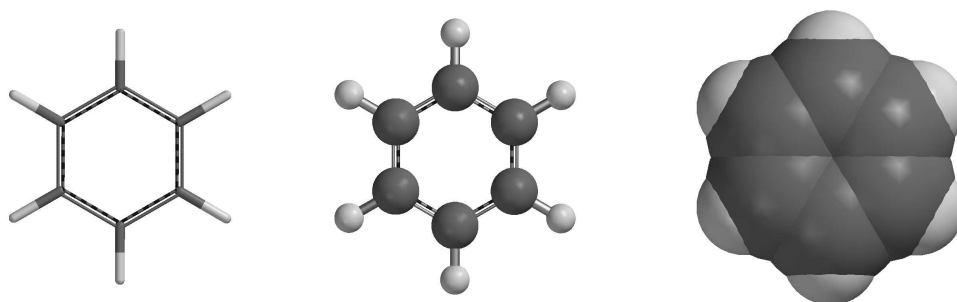
Počítačové modelování struktury a vlastností molekul našlo uplatnění také ve výuce chemie. Tyto postupy umožňují demonstrovat strukturu a reaktivitu chemických sloučenin s využitím výpočtů z oblasti molekulární mechaniky a kvantové chemie.

Počítačem konstruované modely lze rozdělit na:

1. Skeletální modely
2. Kvantově-mechanické modely

#### Skeletální modely [8-12]

Dosavadní praxe počítačového modelování zahrnuje různé způsoby znázorňování struktur molekul. Za pomoci příslušného software lze na monitoru počítače znázornit strukturu anorganických a organických sloučenin s využitím trubičkových, kuličkových nebo kalotových modelů (obr. 5). Tento přístup umožňuje přiblížit studentům především stereochemii molekul.

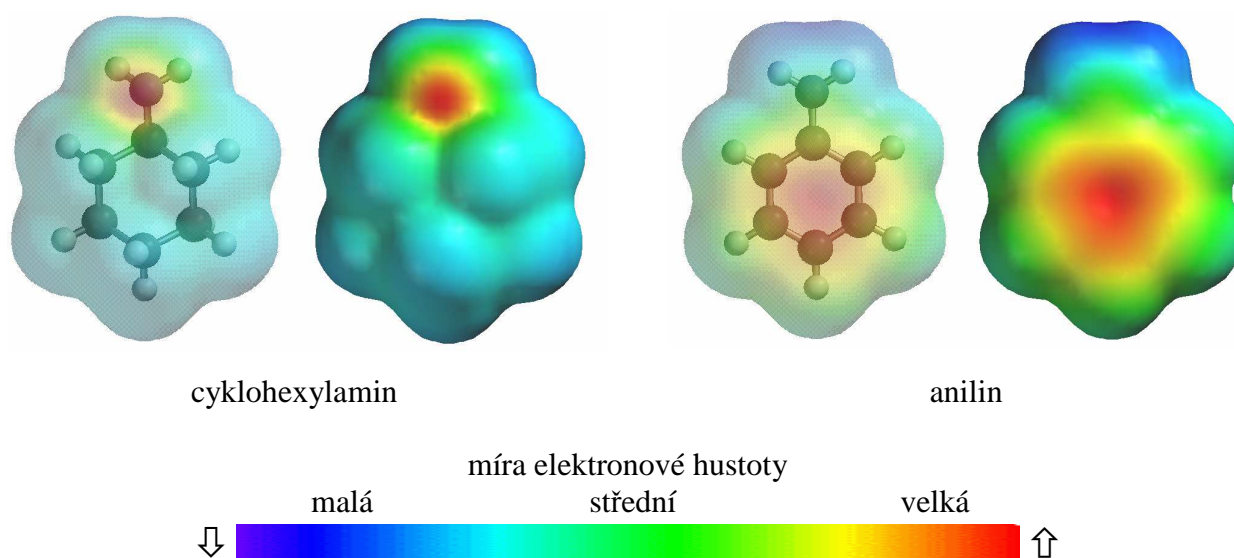


obr. 5 - Skeletální modely benzenu (trubičkový, kuličkový, kalotový)

#### Kvantově-mechanické modely [13-17]

V současné době se prosazuje přístup znázorňující distribuci elektrostatického potenciálu (elektronové hustoty) v molekule (jedná se o tzv. mapy vlastností). Tyto mapy vlastností představují „čtyřdimenzionální“ modely (resp. „electron density models“, obr. 6, s. 11), v nichž se tři dimenze vztahují k prostorovému uspořádání molekuly a „čtvrtá dimenze“ reprezentuje vybranou vlastnost molekuly např. prostřednictvím barevné škály. Pro vyjádření elektrostatických potenciálů (elektronové hustoty) je barevná škála volena následovně: modrá barva vyjadřuje velké pozitivní hodnoty potenciálu (nízká elektronová hustota), červená velké negativní hodnoty potenciálu (vysoká elektronová hustota).

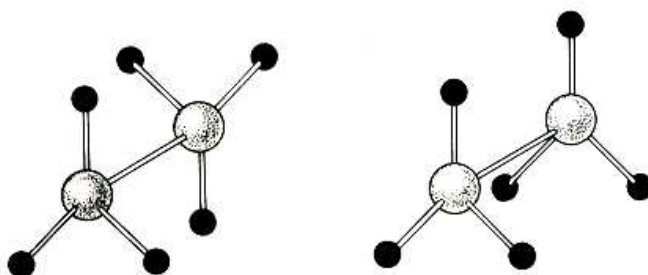
Výukové aplikace těchto modelů představují nové přístupy k popisu struktury molekul a jejich fyzikálních, chemických i biologických vlastností. K řešení uvedené problematiky významně přispěli někteří zahraniční autoři např. prof. dr. D. Steiner (Friedrich Alexander Universität, Erlangen-Nürnberg) [15-20] a prof. dr. A. J. Shusterman (Reed College, Portland) [14]. Pomocí kvantově-mechanických modelů lze vyjádřit elektronovou hustotu, elektrostatický potenciál, případně je možné využít orbitálních diagramů. (Podrobněji jsou tyto záležitosti rozpracovány v kapitolách 4.1-4.3, s. 17-23.)



**obr. 6 - Kvantově-mechanické modely molekuly cyklohexylaminu a anilinu zobrazující elektronovou hustotu pomocí barevné škály**

## 2.2 *Prezentace struktury chemických látek v učivu chemie na gymnáziu [25-29]*

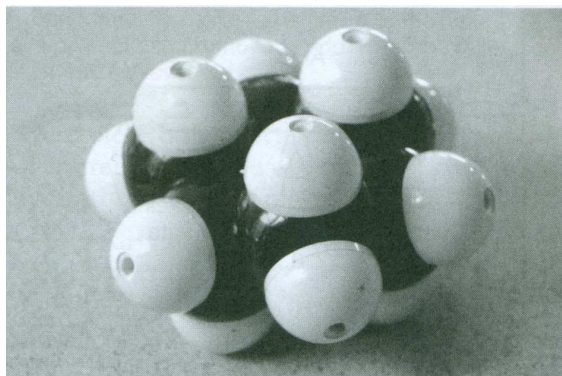
V podstatě ani elementární kurz chemie nemůže být uskutečněn bez chemických značek vzorců a modelů, které představují víceméně abecedu chemie. Učivo na gymnáziu [26-29] obsahuje symboliku nezbytnou pro vyjádření složení a struktury chemických látek, přičemž se jedná především o základní typy vzorců, vzorce souhrnné a vzorce konstituční, které vyjadřují vzájemné vazby mezi jednotlivými atomy v molekule. Uvedené základní typy vzorců jsou doplněny vzorci stereochemickými, které vyjadřují prostorové uspořádání atomů. Pokud jde o prostorové uspořádání atomů, významnou roli ve výuce na gymnáziu hrají různé typy modelů, především materiální. Autoři učebnic a učitelé působící v praxi si uvědomují nezastupitelnost vzorců a modelů jako prostředků názorné výuky učiva chemie. V učivu gymnaziální chemie se objevují standardně souhrnné vzorce, které vyjadřují složení chemických látek (zastoupení jednotlivých prvků a jejich počty). Jinými vzorci, se kterými je možné se v učebnicích gymnázia setkat, jsou vzorce konstituční, ve zkrácené podobě jako vzorce racionální. Tyto tři typy vzorců nechybí také v námi analyzovaných učebnicích chemie pro gymnázia. Méně obvyklé jsou vzorce elektronové, které zahrnují přítomnost volných elektronových párů v molekulách chemických látek. Studenti gymnázií jsou řádně poučeni o vzájemných vazbách mezi atomy v molekule, proto mohou bez větších obtíží pracovat se zkrácenými strukturními vzorci, tj. se vzorci racionálními. V učivu střední školy se ke znázornění prostorového uspořádání atomů používají projekční vzorce. Jde o projekce perspektivní (obr. 7), které jsou vhodně použity pro názornou prezentaci volné rotace



**obr. 7 - Použití perspektivní projekce v učebnici chemie pro gymnázia [27]**

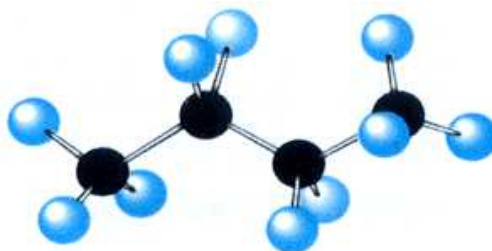
kolem jednoduché vazby u alkanů (konformace). Velmi důležité pro znázornění struktury přírodních látek, především sacharidů jsou projekce Fischerovy, které slouží k vyjádření prostorového uspořádání atomů i v jiných přírodních látkách, např. hydroxykyselinách a aminokyselinách. Tyto druhy vzorců představují jakýsi mezistupeň mezi konstitučními vzorci

a materiálními modely, od nichž jsou odvozeny (projekce materiálního modelu do roviny nákresny). Další zpřístupnění struktury chemických látek studentům představují právě materiální modely. Autoři učebnic tyto modely používají k názornému zobrazení struktury látek z hlediska prostorového uspořádání atomů v molekule. Jedná se ovšem o planární zobrazení materiálních modelů v učebnici (fotografie materiálních modelů, jejich barevné obrázky). Pokud jde o fotografie materiálních modelů (obr. 8), je maximálně využíváno



**obr. 8 - Fotografie kalotového modelu molekuly cyklohexanu v učebnici chemie pro gymnázia [26]**

možnosti fotografie k zobrazení příslušného objektu, pokud jde o obrázky modelů (obr. 9), setkáváme se s různými způsoby stylizace, které jsou příčinou toho, že se obrázky modelů vzdalují reálnému uspořádání atomů v molekule. Z uvedených důvodů je vhodné, aby ve výuce byly používány různé typy materiálních modelů. Dosavadní zkušenosti ukazují, že na gymnáziu zastávají významnou pozici trubičkové a kuličkové modely již z toho důvodu, že jsou nejpřístupnější. Kvalitní kalotové modely jsou často nahrazovány modely nevyhovujícími, které jsou ale dostupné. Situace na školách z hlediska používání materiálních modelů není příznivá, protože kalotové modely jsou pro školy z finančních důvodů obtížně dosažitelné.



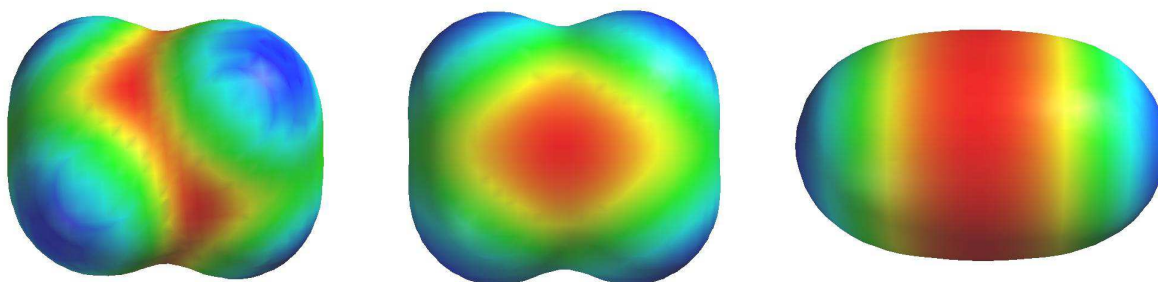
**obr. 9 - Příklad obrázku kuličkového modelu v učebnici chemie pro gymnázia [26]**

V této souvislosti byla provedena obsahová analýza v současné době používaných učebnic chemie pro gymnázia (Příloha 6). Z této analýzy je patrné, že vzorce a modely jsou zařazeny do učebnic chemie tohoto typu střední školy adekvátním způsobem. Pozitivně lze hodnotit také jejich praktické používání ve výuce. Z analýzy učebnic [26-29] však vyplývá, že v gymnaziální chemii s výjimkou jedné učebnice se nevyskytuje elektronový vzorec, který je nezbytný pro kvalifikované posouzení struktury a reaktivity sloučenin.

V gymnaziálním učivu se nenacházejí trubičkové modely, pokud se v textu objeví, jsou většinou označovány jako modely tyčinkové. U kuličkových modelů je použito obvyklého názvosloví a model je účelně využíván ve výuce. V gymnaziálních učebnicích chemie jsou kalotové modely představeny buď jako fotografie, nebo obrázky. Mnoho z nich (obzvláště fotografií) je vcelku zdařilých. I v gymnaziálních učebnicích je však možné se setkat s problémem nedokonalého využití modelů ve vztahu k učebnímu textu.

Řada firem, které se zabývají výrobou učebních pomůcek, nabízí značně neotřelé formy materiálních modelů, které využívají např. barvy ke zvýšení názornosti těchto pomůcek. Tyto barevné materiální modely nacházejí uplatnění především ve výuce biochemie ke znázornění struktury složitých přírodních látek (proteinů, nukleových kyselin).

Analýza učebnic a dalších materiálů ukázala, že používání vzorců a modelů ve výuce chemie je velice rozšířené. Často však vytvářejí tyto modely pouze jakousi dekoraci k učebnímu textu. K aktivnímu propojení modelů s učebním textem většinou nedochází. V této oblasti je proto třeba přistoupit k inovacím. Je tedy zapotřebí hledat nové způsoby názorné prezentace struktury molekul. S intenzivním vývojem informačních technologií se stalo dostupným počítačové modelování struktur chemických látek s využitím metod molekulární mechaniky a kvantové chemie. S přihlédnutím k průběžnému zvyšování úrovně hardwaru a softwaru a poměrně jednoduché obsluze se vytváří prostor ke „spotřebitelskému“ využití kvantově-chemických a molekulárně-mechanických výpočtů. Produktem počítačového modelování se pak stávají molekulární modely, které kromě velikosti a tvaru molekuly vyjadřují určitou vlastnost pomocí barevného kódu. V tomto případě je možné vygenerovat řadu modelů (obr. 10, s. 15), které mohou např. ukázat rozložení elektronové hustoty v molekule chemické látky. I když toto není uzančně dáno, bývá zvykem, jak již bylo zmíněno, označovat místa s nízkou elektronovou hustotou modrou barvou a místa s vysokou elektronovou hustotou barvou červenou. Vzhledem k tomu, že k distribuci elektronové hustoty je využito všech barev spektra, lze v každé části molekuly sledovat rozložení elektronové hustoty. Protože příslušný software pracuje s velmi zjednodušenými výpočetními metodami kvantové chemie (molekulární mechaniky), je možné s těmito modely



**obr. 10 - Příklad použití molekulárních modelů v učebnici chemie pro gymnázia (modely ethanu, ethenu a ethynu) [26]**

počítat pro záměry výuky pouze na základě kritické analýzy - ve vhodných případech. Ve vysokoškolské výuce chemie se tyto modely stávají její neoddělitelnou součástí, ve výuce chemie na gymnáziu se objevují první pokusy o využití těchto modelů. Se značným zájmem a očekáváním je přijímáno zavedení těchto modelů do výuky chemie na základní škole. S využitím molekulárních modelů ve výuce na nižších stupních škol je spojena naděje vztahující se ke zvýšení názornosti výuky a jejího motivačního dopadu na žáky a studenty.

### 3 Cíl práce

Cílem rigorózní práce je výzkum aplikace kvantově chemických modelů typu *property maps* ve výuce organické chemie na gymnáziu. Výzkum vychází z učiva organické chemie, které je uvedeno v příslušných pedagogických dokumentech (RVP) a učebnicích obsahujících doložku MŠMT ČR. Úlohy jsou zaměřeny na řešení problémů struktury a reaktivity organických sloučenin. Některé z úloh souvisejí s charakterizací struktury organických sloučenin, jiné pak napomáhají řešení problémů spojených s reakcemi vybraných typů sloučenin. Nejobtížnější jsou pak úlohy zohledňující komplexně vliv struktury organických sloučenin na jejich chemické a fyzikální vlastnosti. Zajímavé, ale i zároveň velice přínosné jsou úlohy spojené například se substitučním efektem, které souvisejí s jedním z nejvýznamnějších fenoménů organické chemie. Pro srovnání jsou ve výzkumu uvedeny aplikace materiálních modelů, resp. materiálních modelů konstruovaných počítačem, které jsou jakýmsi protipólem modelů molekulárních. Před zahájením výzkumu byla formulována hypotéza: využití počítačových modelů ve výuce je podstatně efektivnější než využití modelů materiálních. Vlastním cílem rigorózní práce je prokázat použitelnost kvantově chemických modelů ve výuce chemie na gymnáziu, které by mělo zvýšit kvalitu výuky, znalosti studentů a jejich schopnost tvůrčím způsobem počítačové modely využívat pro řešení konkrétních problémů v rámci např. učebních úloh.



## 4 Experimentální část

### 4.1 *Metody molekulárního modelování [30-33]*

Rozvoj molekulárního modelování v posledních letech souvisí především s rychlým vývojem počítačové techniky. Počítače jsou dnes v porovnání se situací před několika desetiletími mnohem výkonnější, a to po stránce hardwarové i softwarové. Molekulární modelování je již pevně spjato s počítačovým prostředím a v této souvislosti je předmětem výukových aplikací.

Teoretické základy počítačového molekulárního modelování jsou známy desítky let. Nebereme-li v úvahu principy fungování počítače, je podstatou počítačového modelování relativně dlouho známá Newtonova mechanika ( $\approx 320$  let) a mladší kvantová mechanika ( $\approx 80$  let) [30-31]. Počítač plní funkci kalkulátoru při výpočtech a výsledky pak předává uživateli v numerické a grafické podobě.

Aplikace počítačů přináší výhody v různých ohledech. Umožňují nahradit některé laboratorní experimenty, které jsou většinou nákladné, časově náročné a ve školních podmínkách nerealizovatelné. V řadě případů poskytují o molekule informace, které jsou jinými postupy obtížně získatelné. Jedná se převážně o údaje vypočítané z distribuce elektronů v molekule, např. parciální náboje, dipólový moment, apod. Novodobé programy pro modelování umožňují provádět velké množství výpočtů v poměrně krátké době a jsou schopné tvořit dynamické trojrozměrné rekonstrukce molekul (3D-modely). Běžná je též tvorba tzv. anaglyfů. Jsou-li tyto modely pozorovány speciálními brýlemi (s červeným a modrým sklem), lze je vnímat jako „skutečný“ trojrozměrný útvar.

Podle principu, na kterém je založen výpočet molekulárního modelu, lze rozlišovat dva typy metod modelování [32-33]:

- Molekulárně-mechanické metody
- Kvantově-chemické metody

Obě metody se od sebe odlišují principem fungování, ale vedou svébytným způsobem k výsledkům, jež jsou podkladem pro tvorbu modelu.

**Molekulárně-mechanické metody** – výpočty jsou založeny na klasické Newtonově mechanice. Molekula je chápána jako soubor koulí, které představují atomy, a pružin představujících vazby mezi nimi. Ve výpočtu pak figuruje klasické přitažlivé a odpuzivé síly, hmotnosti, rychlosti atd. Nelze v tomto případě modelovat vlastnosti vyplývající z rozložení

elektronů a jejich přechodů na různé energetické hladiny apod. Model je vytvořen na základě výpočtů energií jednotlivých atomů, které jsou vzájemně v silovém poli (force field). Každý atom je ve svém vazebném stavu popsán charakteristickými empirickými konstantami pro jednotlivé typy silového působení (konstanty pro deformaci vazebných úhlů, torzních úhlů, atd.). Molekulárně-mechanické metody jsou z hlediska matematického aparátu relativně jednoduché a je možné s jejich pomocí provádět výpočty velkých molekul či rozsáhlých molekulárních systémů (např. úseky DNA). Tyto metody nacházejí uplatnění i vedle složitějších a přesnějších kvantově-chemických modelů. Jednodušší úseky výpočtů se provádějí obvyklými postupy a zbývající části, které jsou podstatné pro studovaný jev (např. reakční centrum molekuly), se provedou pomocí kvantově-chemických metod. Příkladem molekulárně-mechanických metod jsou např. metody MMFF nebo SYBYL [32-33].

**Kvantově-chemické metody** – jsou založeny na vlnově mechanických vlastnostech elementárních částic, popsaných Schrödingerovou rovnicí. Řešením této rovnice je vlnová funkce.

Schrödingerovu rovnici lze přesně řešit jen pro systém 1 elektron - 1 proton (tj. atom vodíku). Při počítání složitějších systémů je nezbytné použít aproximace. Interpretace výsledku řešení - vlnové funkce a jejího významu byla dlouho sporným bodem kvantové mechaniky. Podle uznávané tzv. kodaňské interpretace čtverec absolutní hodnoty vlnové funkce udává pravděpodobnost výskytu částice (např. elektronu) v nějakém bodě (přesněji objemovém elementu) prostoru. I když se jedná o složitou problematiku, lze akceptovat charakter výsledků výpočtu vzhledem k tomu, že závěry kvantové mechaniky byly a jsou potvrzovány experimentálně. Významnou překážkou v aplikaci kvantově-chemických metod je složitý matematický aparát. Zvýšení přesnosti výpočtu vede k několikanásobnému prodloužení výpočetní doby. V praxi se proto volí kompromisy mezi výpočetní dobou a přesností výpočtu.

Různé metody, založené na kvantově-chemických výpočtech (semiempirické metody, metody ab initio apod.), se od sebe odlišují typem aproximace použité při řešení Schrödingerovy rovnice. Příkladem kvantově-chemických metod jsou semiempirické metody (např. AM1, PM3, MNDO), ab initio metody (např. MP2, MP3, MP4) [32-33]. Metoda PM3 byla použita pro výpočty i v této práci. V této souvislosti již máme určité zkušenosti s tvorbou molekulárních modelů a jejich využitím ve výuce chemie na různých typech škol [34-43; kapitola 8].

## **4.2 Charakteristika softwaru pro molekulární modelování [44-50]**

Softwarem použitelným pro tvorbu molekulárních modelů jako perspektivních didaktických pomůcek je např. PC Spartan Pro [44-47] firmy Wavefunction. Pomocí tohoto programu lze konstruovat různé typy modelů organických i anorganických sloučenin (kuličkové, kalotové aj.). Jednotlivé typy modelů jsou ukázány na příkladu chlormethanu (obr. 12 a 13, s. 21). Program umožňuje také vytváření třírozměrného pohledu na objekty, nejjednodušším příkladem jsou anaglyfy, náročnější přístup představuje objekt VRML (Virtual Reality Modelling Language).

PC Spartan Pro umožňuje postihnout takové jevy jako delokalizace elektronů, mezimolekulové interakce nebo některé aspekty chemické reaktivity (modelování průběhu reakce) [44].

Takto vytvořené podklady lze dále využít v prezentacích při přednáškách pro studenty, obzvláště na vysoké škole, v učebnicích i učebních pomůckách. Na střední škole mohou být využity např. jako transparenty pro data projektory (Příloha 2). Tyto modely molekul mohou přispět k bližšímu poznání fyzikálních, chemických, ale i biologických vlastností sloučenin ve vztahu k jejich struktuře.

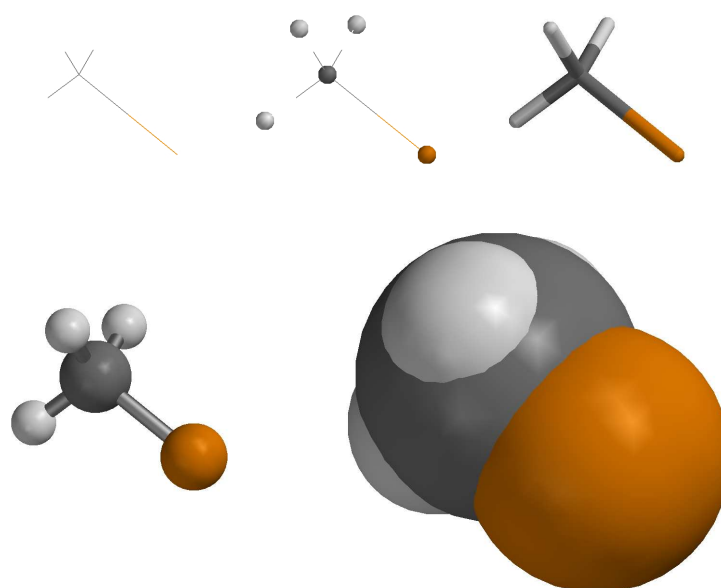
Kromě již zmíněného programu PC Spartan Pro, který je v současné době nabízen ve verzi 10, je pro molekulární modelování k dispozici ještě několik dalších programů. Lze zmínit např. Mac Spartan Pro [47-49] a Titan [50]. Oba softwarové produkty mají téměř identickou uživatelskou podobu jako PC Spartan Pro (stejná uživatelská nabídka, způsob vytváření modelů, grafický výstup atd.), což je z velké části dáno tím, že všechny pocházejí od stejného producenta - firmy Wavefunction. Plné verze těchto programů jsou schopné provádět molekulárně-mechanické výpočty (silové pole SYBYL), semiempirické QM (quantum mechanic) výpočty metodou AM1 a ab initio QM výpočty na úrovni bazí 3-21G, 3-21G\* a 6-31G\* spolu s analýzou vibračních frekvencí a lokalizací tranzitních stavů. V detailnějším pohledu na dostupné metody kvantově-mechanických výpočtů se programy odlišují. Možnosti grafické reprezentace výsledků jsou bohaté - animace vibračních stavů, barevné mapování elektrostatického potenciálu na povrchu molekuly nebo stereoskopické zobrazení molekuly rozkladem na červený a modrý snímek (anaglyf). Programy jsou vybaveny poměrně jednoduchým editorem pro konstrukci molekulárních modelů.

Ekvivalentem k softwaru firmy Wavefunction, Inc. jsou programy HyperChem – aktuálně verze 8.0.10 (Hypercube, Inc.), Gaussian – aktuálně verze 09 (Gaussian, Inc.),

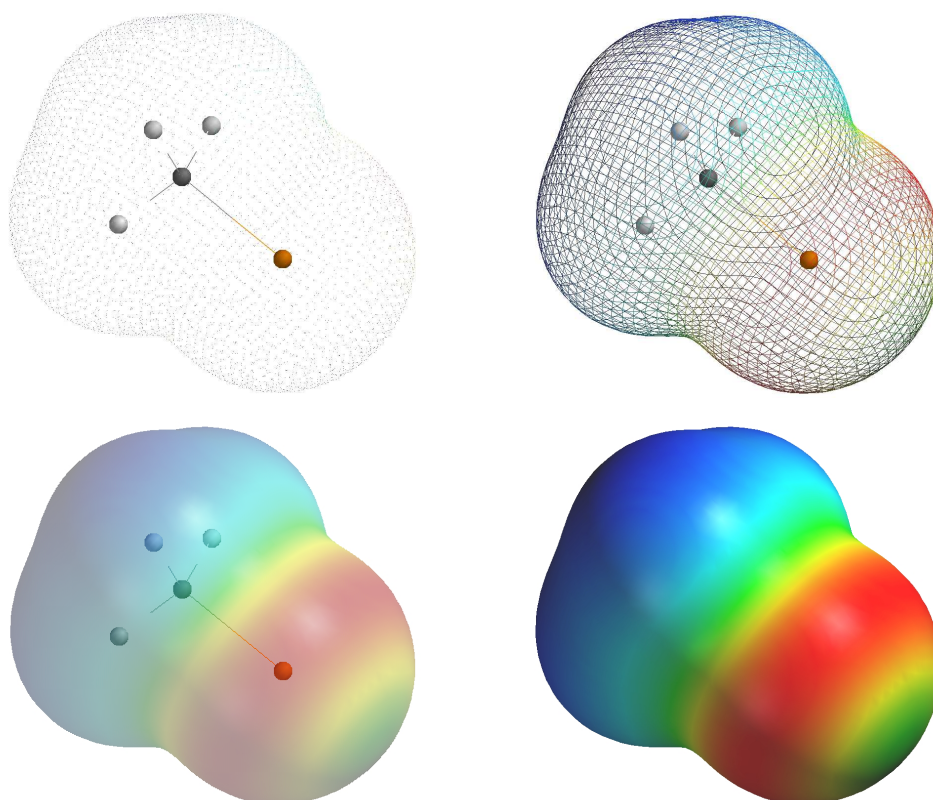
Chem3D z balíčku ChemOffice – aktuálně verze Ultra 2010 Suite (CambridgeSoft, Corp.) a jiné. Většina výrobců tohoto typu softwaru nabízí svoje programy pro všechny tři nejznámější platformy (Windows, Mac a Linux). V současné době modifikují programátoři svoje produkty nejen pro použití na „klasickém“ PC, ale i pro stále více oblíbené tablety a mobilní telefony (obr. 11). Jednou z progresivních společností v tomto směru je firma Hypercube, Inc., která pro tyto účely transformovala svůj HyperChem 8.0.10 na aplikace: Mobile HyperChem Free a Mobile HyperChem Level 1. Tyto softwarové deriváty neposkytují uživateli plně komfortní zázemí jako profesionální verze programu HyperChem 8.0.10 (např. rozličné typy výpočtů a plnohodnotnou internetovou komunikaci s ústředním serverem společnosti). Mezi jejich hlavní přednosti ale patří mobilita, což je z velké části determinováno typem přístrojů, v kterých vytvářejí dané virtuální prostředí. Modely lze jednoduše vytvářet (sestavovat), zobrazovat a manipulovat s nimi (např. otáčet, přesouvat, zvětšovat a prohlížet strukturní vlastnosti - vazebné délky, úhly apod.). Za zmínku stojí i fakt, že softwarové aplikace Mobile HyperChem jsou vyvíjeny především pro mobilní výrobky společnosti Apple Inc. (iPad, iPod Touch a iPhone).



**obr. 11 - Vizualizace molekulárních modelů pomocí tabletu a mobilního telefonu [51]**



**obr. 12 - Modely molekuly chlormethanu (Wire, Ball and Wire, Tube, Ball and Spoke, Space Filling)**



**obr. 13 - Jiné možnosti zobrazení molekuly chlormethanu (Single Point Energy, Density Functional, SVWN/DN\*, PM3)**

### 4.3 Konstrukce molekulárních modelů vybraných chemických látek

Jak již bylo uvedeno v předcházející kapitole, mezi perspektivní didaktické pomůcky patří bezesporu řada softwarových produktů firmy Wavefunction, Inc., vytvořených pro konstrukci molekulárních modelů. V této kapitole je uvedeno modelování molekuly konkrétní chemické sloučeniny (methylchloridu) pomocí počítačového programu PC Spartan Pro [44-47] výše uvedené společnosti. Konstrukci molekulárního modelu lze rozdělit do následujících kroků (Příloha 3):

**Krok 1 – Otevření programu** (Po kliknutí na ikonu programu se na monitoru zobrazí základní grafické prostředí.)

**Krok 2 – Aktivace panelu pro konstrukci molekul** (Po kliknutí na levou horní ikonu označenou názvem NEW se objeví v pravé části monitoru panel pro konstrukci molekul.)

**Krok 3 – Konstrukce skeletálního modelu molekuly  $\text{CH}_3\text{-Cl}$**  (Jednotlivé atomy se volí kliknutím do panelu pro konstrukci molekul a následným kliknutím na pracovní plochu. Zobrazí se jako kuličky s odpovídajícím zbarvením. Konstrukce se začíná zpravidla atomem uhlíku a další atomy se připojí automaticky po kliknutí na odpovídající vazby vystupující z atomu uhlíku.)

**Krok 4 – Přidání „čtvrtého rozměru“ (vlastnosti) – povrchu – Surfaces** (Cesta: Setup – Surfaces – v prvním dialogovém oknu kliknout na Add – v dalším dialogovém oknu navolit Surfaces-density, Property-potential, Resolution-medium a potvrdit OK – v prvním dialogovém oknu se objeví zadané informace.)

**Krok 5 – Volba metody výpočtu** (Cesta: Setup – Calculations – v nově zobrazeném dialogovém oknu nastavit metodu výpočtu PM3 a potvrdit OK.)

**Krok 6 – Zahájení výpočtu** (Cesta: Setup – Submit.)

**Krok 7 – Určení místa uložení modelu** (V nově zobrazeném dialogovém oknu je třeba zadat místo, kam se má po výpočtu soubor uložit. Cesta: přiřazení místa uložení souboru – zadání názvu souboru – kliknout na Uložit.)

**Krok 8 – Potvrzení informace o zahájení výpočtu** (Potvrdit OK.)

**Krok 9 – Potvrzení informace o ukončení výpočtu** (Potvrdit OK.)

**Krok 10 – Zobrazení výsledného výpočtu povrchu – Surfaces** (Cesta: v zobrazeném dialogovém okně kliknout na žlutý čtvereček.)

**Krok 11 – Volba typu modelu** (Po kliknutí přímo na model molekuly methylchloridu je možné v pravé části spodní lišty zadat typ zobrazeného modelu. Cesta: roletové menu vpravo dole - kromě již zobrazeného solid modelu je možné zvolit také transparent model apod.)

#### 4.4 Metody pedagogického výzkumu [52-58]

Výzkumné metody je všeobecný název pro postupy, jimiž se realizuje měření a získávání dat v pedagogickém výzkumu. Tyto metody označujeme také jako metody sběru dat. Mezi základní atributy výzkumných postupů patří validita a reliabilita. Validita znamená schopnost výzkumného prostředku zjišťovat to, co zjišťovat má. Reliabilita vypovídá o přesnosti a spolehlivosti výzkumného prostředku. Mezi metody sběru dat náleží např. testy, dotazníky, interview a pozorování. Vzhledem k charakteru pedagogického výzkumu je následující text věnován především problematice testů.

Pojem didaktický test lze definovat jako „nástroj systematického zjišťování (měření) výsledků výuky.“ (P.Byčkovský, 1982). Základem testování je písemné měření výkonu žáků, které je kvantifikováno. Výsledek testu je vyjádřen bodovým ohodnocením, dosažením určitého skóre. Zjišťované položky (vědomosti, dovednosti) tedy musí být formulovány tak, aby byly měřitelné, kvantifikovatelné. Jednotlivé druhy didaktických testů (tab. 1) mají své specifické vlastnosti a liší se tím, jaké informace jejich prostřednictvím získáváme.

<b>KLASIFIKAČNÍ HLEDISKO</b>	<b>DRUHY TESTŮ</b>		
měrná charakteristika výkonu	rychlosti		úrovně
dokonalost přípravy testu a jeho příslušenství	standardizované	kvazi-standardizované	ne-standardizované
povaha činnosti testovaného	kognitivní		psychomotorické
míra specifčnosti učení zjišťovaného testem	výsledků výuky		studijních předpokladů
interpretace výkonu	rozlišující (relativního výkonu)		ověřující (absolutního výkonu)
časové zařazení do výuky	vstupní	průběžné (formativní)	výstupní (sumativní)
tematický rozsah	monotematické		polytematické
míra objektivity skórování	objektivně skórovatelné	kvaziobjektivně skórovatelné	subjektivně skórovatelné

**tab. 1 - Druhy didaktických testů [54]**



Ve fázi konstrukce didaktického testu je důležité rozhodnout, který typ úloh je vhodné použít, o čemž zpravidla rozhoduje cíl, který má testování plnit a obsah učiva, který má být předmětem testování.

Didaktický test je vytvořen z jednotlivých testových úloh. Testovou úlohou rozumíme otázku, úkol nebo problém obsažený v testu. Na kvalitě testových úloh závisí v podstatné míře kvalita celého testování.

Při navrhování všech typů testových úloh by se měly dodržovat následující obecně platné zásady:

- 1) Vyhýbáme se úlohám kvizového charakteru. Tyto úlohy mohou být sice pro respondenty zábavné, ale k serióznímu měření výsledků vzdělávací činnosti se nehodí.
- 2) Snažíme se navrhovat testové úlohy, které jsou navzájem nezávislé, tj. takové, u nichž správné vyřešení jedné úlohy není vázáno na správné vyřešení jiné úlohy v testu.
- 3) Při formulaci testových úloh musíme dbát na to, aby již tyto formulace neobsahovaly nápoředu správné odpovědi (tzv. nezamýšlená nápoředu). Zdrojem nápoředu u úloh s výběrem odpovědi bývá často např. obsahová, formální nebo jiná odlišnost správné odpovědi od distraktorů (označujeme nesprávné odpovědi, které se žákům předkládají k výběru).
- 4) V didaktických testech zásadně nepoužíváme tzv. „chytáků“, u nichž nezkoušíme stupeň zvládnutí učiva, ale zcela jiné charakteristiky žáka (např. postřeh, vtip atd.).
- 5) Při hodnocení odpovědí v testu je nejvhodnější užívat tzv. jednoduchého skórování (binárního skórování) úloh, kdy za správnou odpověď v kterékoli úloze připisujeme vždy jen jeden bod. Ukazuje se, že tento způsob skórování u běžných testů s objektivně skórovatelnými úlohami plně vyhovuje.
- 6) Testových úloh bychom měli navrhovat vždy o něco více, než kolik má obsahovat konečná podoba testu. Při ověřování testu se totiž zpravidla ukáže, že řada úloh z různých příčin nevyhovuje.
- 7) Náležitou pozornost je třeba také věnovat grafické úpravě úloh. Text musí být dokonale čitelný a přehledný, písmo dostatečně velké a výrazné. Obrázky by měly vykazovat dostatečné rozlišení a barevně odpovídat původní předloze.

Hlavními výzkumnými metodami pedagogického výzkumu, kterým se zabývá tato práce jsou polynomické (výběrové) testy. Dvěma souběžným skupinám respondentů byly předloženy výše uvedené druhy testů, které se lišily pouze v typu modelů zobrazujících stejné chemické sloučeniny. Zatímco první skupina studentů řešila polynomické testové úlohy

s počítačem generovanými materiálními modely (Příklad 1), druhá skupina věnovala pozornost těm samým výběrovým testovým položkám, které však obsahovaly modely molekulární, resp. počítačové modely se zobrazením elektronové hustoty (Příklad 2).

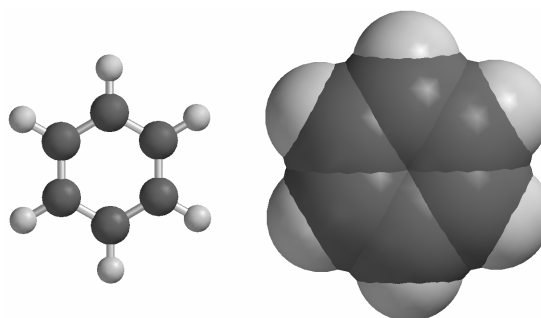
Příklad 1:

*Nejznámější reakcí arenů je elektrofilní aromatická substituce. Při reakci benzenu s chlorem vzniká konečný produkt chlorbenzen. Atom chloru v molekule benzenu nahrazuje atom vodíku. S přihlédnutím k materiálním modelům molekuly benzenu rozhodněte zda se atom vodíku při reakci odštěpuje ve formě částice:*

a)  $H^+$

b)  $H^-$

c)  $H^\bullet$



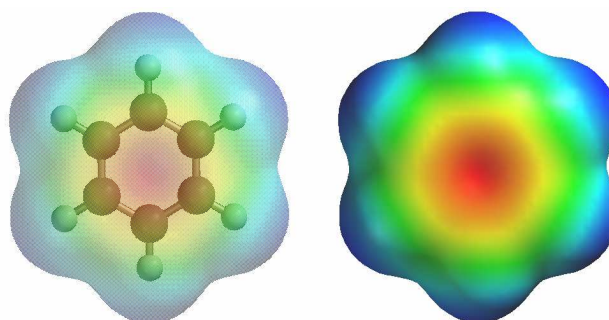
Příklad 2:

*Nejznámější reakcí arenů je elektrofilní aromatická substituce. Při reakci benzenu s chlorem vzniká konečný produkt chlorbenzen. Atom chloru v molekule benzenu nahrazuje atom vodíku. S přihlédnutím k počítačovým modelům molekuly benzenu rozhodněte zda se atom vodíku při reakci odštěpuje ve formě částice:*

a)  $H^+$

b)  $H^-$

c)  $H^\bullet$



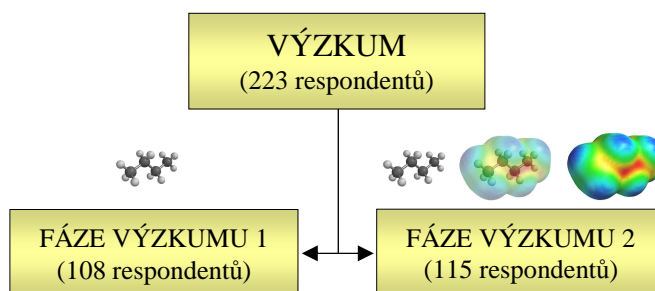
## 4.5 Výzkum využití molekulárních modelů ve výuce chemie na gymnáziu

Celý výzkum realizovaný na gymnáziích v rámci zkoumání využití molekulárních modelů ve výuce chemie lze rozčlenit do následujících etap:

1. příprava testů a doprovodných materiálů
2. instruktáž pedagogů zajišťujících výuku a výzkum
3. realizace vlastního výzkumu

### 4.5.1 Příprava testů a doprovodných materiálů [52-56]

Na základě uvedené odborné literatury a potřeb vyplývajících z konkrétní zkoumané problematiky byly zhotoveny dva testy, které odpovídají stejnému počtu souběžných fází *vlastního* výzkumu. Tyto fáze lze rozdělit takto: fáze výzkumu 1 (do výuky byly zařazeny klasické materiální modely), fáze výzkumu 2 (ve výuce byly použity jak klasické materiální modely, tak modely počítačové - molekulární) (obr. 14). S konkrétní podobou jednotlivých testů (rozdělených podle fází *vlastního* výzkumu) je možné se seznámit v Příloze 7 a 8.



obr. 14 - Fáze výzkumu s informací o počtech respondentů

Kromě testů bylo třeba pro studenty gymnázií zhotovit i doprovodné materiály. Tyto materiály byly následně použity při výuce chemie s využitím počítačových - molekulárních modelů. Jejich přehled a popis je zde:

1. Přehled vzorců a modelů (A4) – obsahuje přehled základních typů chemických vzorců a modelů (materiálních, počítačových a kombinovaných). Dále je zde uvedeno barevné rozlišení atomů v kuličkových modelech a barevné rozlišení distribuce elektronové hustoty v počítačových modelech (Příloha 1).

2. Nástěnné transparenty (A3) – obsahují zobrazení jednodušších uhlovodíků a jejich derivátů pomocí základních typů materiálních, počítačových a kombinovaných modelů (Příloha 2).

3. Manuál k programu PC Spartan Pro (PC) – obsahuje základní instruktáž ohledně konstrukce molekulárních modelů chemických sloučenin (Příloha 3).

4. Výukový CD-ROM (zhotoven s použitím programu PC Spartan View firmy Wavefunction, Inc.) - tento prohlížeč umožňuje mimo jiné i zobrazení různých typů modelů (materiálních, počítačových a kombinovaných) a práci s nimi (změnu velikosti, posouvání po ploše monitoru, otáčení atd.). Nespornou výhodou tohoto prohlížeče je fakt, že jeho prostřednictvím je možné používat hotové modely (zkonstruované pomocí programů Spartan firmy Wavefunction, Inc. ) i na méně výkonných počítačích (Příloha 4).

5. Manuál k výukovému CD-ROMu (A4) – obsahuje základní instruktáž ohledně použití výše uvedeného CD-ROMu (Příloha 5).

#### **4.5.2 Instruktáž pedagogů zajišťujících výuku a výzkum**

Instruktáž pedagogů participujících na výzkumu, který je orientován na problematiku využití molekulárních modelů ve výuce chemie na gymnáziu, patřila ke stěžejním bodům celého projektu. U pedagogů, kteří vyučovali chemii klasickým způsobem (resp. s použitím materiálních modelů), se jednalo o základní instruktáž. V případě učitelů, kteří vyučovali chemii s využitím počítačových - molekulárních modelů, bylo třeba přípravě věnovat poněkud větší prostor, což odpovídá charakteru dané problematiky. Každý z učitelů obdržel všechny (v předešlé kapitole uvedené) doprovodné materiály.

#### **4.5.3 Realizace vlastního výzkumu**

Po přípravě testů a doprovodných materiálů, následné instruktáži pedagogů a probrání odpovídajícího učiva se studenty (ať už s využitím počítačových - molekulárních modelů, či nikoliv) bylo možné přistoupit k realizaci vlastního výzkumu. Testové šetření bylo provedeno v rámci celkového opakování učiva odpovídajícího zkoumané problematice. Při výzkumu byly zohledněny individuální schopnosti jednotlivých respondentů, a proto byl stanoven pouze přibližný časový limit odevzdání vyřešených testů (20 min.).

## 4.6 Vyhodnocení pedagogického výzkumu [52-56]

Jak bylo již uvedeno v předcházejících kapitolách, hlavním cílem této práce je zjistit, do jaké míry ovlivnilo začlenění molekulárních modelů do výuky chemie na gymnáziu poznatkovou strukturu studentů. K tomu je zapotřebí provést vyhodnocení didaktických testů, které byly k tomuto účelu připraveny. Metodiku vyhodnocení testů je možné popsat následujícím způsobem:

1. Vyhodnocení testů za účelem získání vstupních dat. Vstupními daty se rozumí především počet respondentů, kteří volili danou alternativu u určité testové položky.
2. Zpracování vstupních dat s použitím následujícího vztahu:

$$X(t; u; o) = \frac{a \cdot 100}{b} \quad [\%]$$

X - úspěšnost řešení dané úlohy [v %]

t - označení typu zadaného testu (1, 2)

u - označení řešené úlohy v testu (1 - 10)

o - označení volené odpovědi v úloze (a, b, c)

a - skutečný počet respondentů, kteří volili určitou alternativu úlohy v daném testu

b - max. možný počet respondentů, kteří mohli volit určitou alternativu úlohy v daném testu

Příklad výpočtu:

$$X(2; 8; a) = \frac{63 \cdot 100}{115}$$

$$X(2; 8; a) = 54,78\%$$

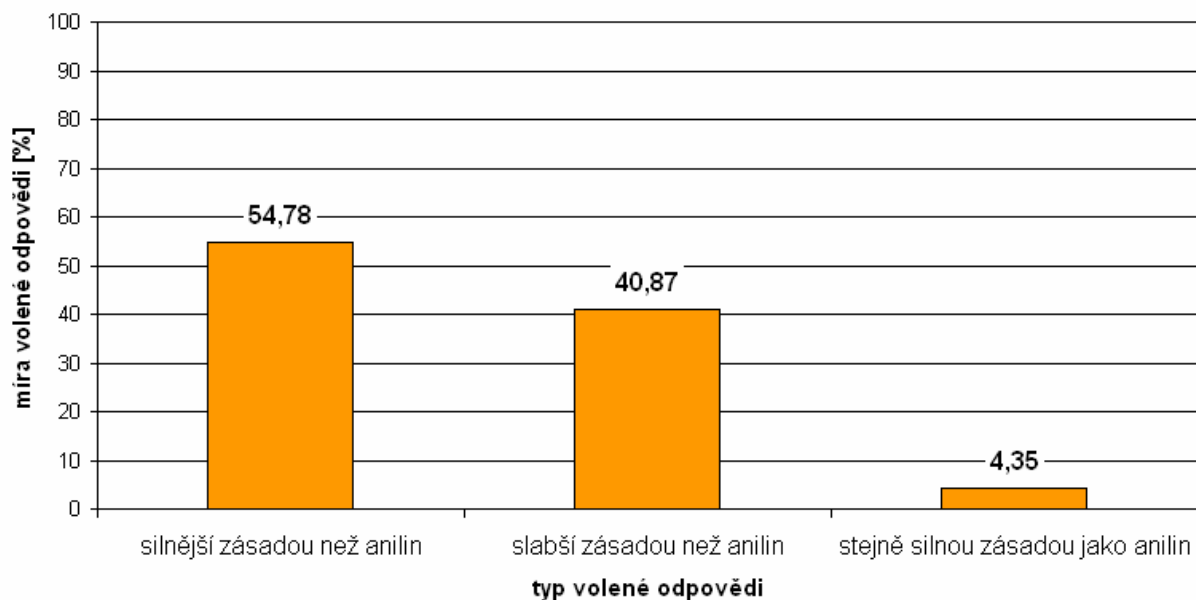
Z toho vyplývá, že v testu č. 2 (který byl určen studentům, kteří absolvovali gymnaziální výuku chemie se zakomponovanými počítačovými modely) volilo v osmé úloze první možnou alternativu (a) 63 ze 115 respondentů, resp. tuto volbu učinilo 54,78 % studentů.

3. Převedení získaných výsledků výzkumu do grafické podoby.

Do této podoby byly získané výsledky převedeny pomocí programu Excel firmy Microsoft. K tomuto účelu bylo využito sloupcových grafů (obr. 15, s. 30). Konkrétní číselné a grafické

údaje jednotlivých výpočtů, jakož i přesné citace úloh z hlediska jejich typologie jsou uvedeny v Přílohách 7 - 10.

**8. Porovnejte počítačové modely molekul cyklohexylaminu a anilinu. Rozhodněte zda je cyklohexylamin:**



**obr. 15 - Příklad využití sloupcového grafu v pedagogickém výzkumu**

## 5 Výsledky a diskuse

Pro pedagogický výzkum bylo navrženo deset jednoduchých úloh z organické chemie, které studenti řeší za pomoci materiálních a počítačových modelů. Diskuse výsledků výzkumu ukazuje jednoznačně na výhody využití počítačových modelů při řešení úloh ve srovnání s modely materiálními. Pedagogické šetření bylo realizováno na státních gymnáziích v Hradci Králové ve školním roce 2009/2010 za účasti 223 respondentů. Výsledky výzkumu byly následně prezentovány prostřednictvím odborných periodik [kapitola 8].

### Hodnocení výsledků výzkumu:

**Úloha č. 1:** Na základě materiálních (počítačových) modelů popište distribuci elektronové hustoty v molekule methanu. Atom C přitahuje elektrony : méně (více) než atom H, stejně jako atom H.

**Diskuse:** Při použití materiálních modelů většina respondentů zvolila správnou variantu – Atom uhlíku přitahuje elektrony více než atom vodíku (83,33%). Vzhledem k tomu, že materiální model prakticky nepřispívá k řešení úlohy, lze se domnívat, že správné řešení studenti odvozují od poznatků o elektronegativitě atomů. Použití počítačových modelů dále přispívá k volbě správného řešení (94,78%), v tomto případě je význam počítačového modelu pro volbu správné varianty evidentní.

**Úloha č. 2 :** Nejznámější reakcí arenů je elektrofilní aromatická substituce. Při reakci benzenu s chlorem vzniká konečný produkt chlorbenzen. Atom chloru v molekule benzenu nahrazuje atom vodíku. S přihlédnutím k materiálním (počítačovým) modelům molekuly benzenu rozhodněte, zda se atom vodíku při reakci odštěpuje ve formě částice:  $H^+$ ,  $H$ ,  $H\bullet$ .

**Diskuse:** Jestliže je použito materiálních modelů, většina respondentů (66,67%) správně zvolila alternativu  $H^+$ . Správná volba může souviset s obecnými poznatky o nejvýznamnější reakci arenů – elektrofilní aromatické substituci. Použití počítačových modelů výrazně přispělo k volbě správné varianty (88,69). Barevná škála v tomto případě jednoznačně určuje odštěpení atomu vodíku ve formě protonu.

**Úloha č. 3 :** Pomocí materiálních (počítačových) modelů molekuly methylchloridu určete, jaká je polarita vazby C-Cl. Na atomu C je elektronová hustota: stejná jako na atomu Cl, nižší (vyšší) než na atomu Cl.

**Diskuse:** Při použití materiálních modelů většina respondentů vybrala správnou variantu (69,44%). Úspěšnost řešení úlohy zřejmě souvisí s již zmíněnou znalostí polarit vazeb na základě elektronegativit atomů vazbou spojených, protože materiální model k řešení takovéto úlohy nemůže přispět. Použití počítačového modelu vede ke zvýšení volby správné varianty řešení (87,83%) v důsledku využití barevného kódu.

**Úloha č. 4:** Reakcí ethanolu s kyselinou bromovodíkovou vzniká ethylbromid a voda. Pomocí studia materiálních (počítačových) modelů navrhnete, který atom molekuly ethanolu je při výše uvedené reakci primárně napadán částicí  $H^+$ : atom C na kterém je vázána OH skupina, atom H vázaný na atomu O, atom O.

**Diskuse:** V případě použití materiálních modelů téměř polovina respondentů vybrala správnou variantu (49,07%). Protože materiální model k řešení této úlohy nemůže přispět, respondenti se pravděpodobně opírají pouze o obecné znalosti reaktivity organických sloučenin. Použití počítačového modelu vede k výraznému zvýšení úspěšnosti řešení (73,04%). Barevné spektrum v počítačových modelech představuje v tomto případě velice významnou pomoc.

**Úloha č. 5:** Aceton je sloučenina velmi dobře rozpustná ve vodě. Příčinou rozpustnosti jsou vodíkové vazby, které se tvoří mezi molekulami acetonu a vody. Na základě materiálních (počítačových) modelů rozhodněte, který atom molekuly acetonu se účastní vzniku vodíkové vazby při interakci s molekulou vody: atom H, atom O, atom C.

**Diskuse:** Je-li použit materiální model, prakticky polovina respondentů vybrala správnou variantu (51,85%). Materiální model k řešení této úlohy může přispět jen velmi omezeně, respondenti v tomto případě spíše intuitivně odhadují správnou variantu řešení. Využití počítačového modelu vede ke zvýšení úspěšnosti řešení (60,87%). Barevná škála v počítačových modelech napomůže pouze omezeně, respondenti postupují při řešení víceméně intuitivně.



**Úloha č. 6:** S využitím materiálních (počítačových) modelů molekuly kyseliny octové odhadněte, který atom vodíku se nejsnáze odštěpí jako částice  $H^+$ : atom H na atomu O, atom H na atomu C, žádný atom H.

**Diskuse:** Pomocí materiálních modelů úspěšně řešila úlohu nadpoloviční většina respondentů (58,33%). Počítačové modely výrazně napomohly úspěšnému řešení úlohy (83,48%). Poměrně úspěšné řešení v prvním případě může vycházet ze znalostí vlastností kyselin. Význam barevného kódu u počítačových modelů je jednoznačný.

**Úloha č. 7:** Molekula dichloridu kyseliny uhličitě (fosgenu) je známa svojí extrémní reaktivitou vůči nukleofilním činidlům ( $H_2O$ ,  $NH_3$ ). Po seznámení se s materiálními (počítačovými) modely molekuly fosgenu zdůvodněte jeho vysokou reaktivitu a to jako důsledek: nízké (vysoké, střední) polarity vazby C–Cl.

**Diskuse:** Materiální modely nemají význam pro řešení úlohy tohoto typu, nicméně úspěšně řešila úlohu polovina respondentů (50,92%), zřejmě na základě obecných poznatků o polaritě vazeb. Počítačové modely značně přispěly k úspěšnému řešení úlohy (68,70%). Zřejmě se uplatnil význam barevného spektra pro posouzení polarity vazeb.

**Úloha č. 8:** Porovnejte materiální (počítačové) modely molekul cyklohexylaminu a anilinu. Rozhodněte, zda je cyklohexylamin silnější (slabší, stejně silnou) zásadou než anilin.

**Diskuse:** Při řešení úloh tohoto typu se materiální modely příliš neosvědčily. Úspěšně řešila úlohu necelá polovina respondentů (47,22%), prakticky stejný počet však tvrdil pravý opak. Nedostatečné povědomí o substitučním efektu ve vztahu k chemickým vlastnostem, v tomto případě jde o bazicitu látek, je pravděpodobnou příčinou těchto výsledků. Počítačové modely jen do určité míry přispěly k úspěšnému řešení úlohy (54,78%). Problematika substitučního efektu v návaznosti na vlastnosti látek je s největší pravděpodobností do té míry náročná, že ani pomocí barevné škály nebylo dosaženo uspokojivých výsledků.

**Úloha č. 9:** Na základě porovnání materiálních (počítačových) modelů molekul anilinu a benzenu určete, k jakým interakcím dochází mezi aminoskupinou a benzenovým jádrem. Určete, zda aminoskupina v molekule anilinu: dodává (odebírá) elektrony benzenovému jádru, nedodává ani neodebírá elektrony benzenovému jádru.

**Diskuse:** Materiální modely nepřispívají k řešení úloh zaměřených na problematiku substitučního efektu, úspěšně vyřešila úlohu jen necelá polovina respondentů (41,67%). Hodnocení substitučního efektu s využitím počítačových modelů lze kvalifikovat jako úspěšné (67,83%). Je zřejmé, že problematika prostého substitučního efektu bez další návaznosti je úspěšně řešitelná pomocí počítačových modelů díky barevnému kódu.

**Úloha č. 10:** Při redukci nitrosloučeniny dochází ke změně nitroskupiny na aminoskupinu. Redukce se často provádí kovy. Atakujícím činidlem při redukci je elektron ( $e^-$ ). Po seznámení se s níže uvedenými materiálními (počítačovými) modely rozhodněte, který atom nitroskupiny molekuly nitrobenzenu je napadán elektronem (atom O, atom C, atom N).

**Diskuse:** K řešení úloh tohoto typu materiální modely nepřispívají, úspěšně vyřešila úlohu necelá polovina respondentů (44,44%), která mohla vycházet pouze z obecných poznatků o reaktivitě organických sloučenin. Počítačové modely značně napomohly úspěšnému řešení úlohy (62,61%). Barevná škála reprezentující distribuci elektronové hustoty v molekule nepochybně přispěla k upřesnění orientace respondentů při hodnocení průběhu reakce.

## 6 Závěr

Výzkum ukázal na významný přínos molekulárních modelů aplikovaných pro potřeby vybraných tematických celků učiva pro pochopení a osvojení si učiva středoškolské organické chemie. Tento přínos molekulárních modelů však souvisí s charakterem úlohy. Vyhodnocení výsledků výzkumu ukázalo na rozdělení úloh v podstatě do tří skupin. První skupinu tvoří úlohy s vysokým počtem správných řešení bez použití molekulárních modelů. Aplikace těchto modelů vede ke zvýšení úspěšnosti, které je spojeno s relativně malým navýšením správných řešení (úloha č. 1). Jedná se o úlohu zaměřenou na distribuci elektronové hustoty v molekule, k jejímuž úspěšnému řešení postačí povědomí o elektronegativitě atomů a polaritě vazeb. Druhou skupinu tvoří úlohy s nízkým počtem správných řešení bez použití molekulárních modelů. Aplikace uvedených modelů vede k výraznému zvýšení úspěšnosti řešení úloh (úloha č. 9). Jde o úlohu zaměřenou na problematiku substitučního efektu v molekulách arenů. Molekulární modely významně přispívají k představám o rozložení elektronové hustoty v důsledku interakce substituentu s uhlovodíkovým zbytkem. Třetí skupinu tvoří úlohy s nízkým počtem správných řešení bez použití molekulárních modelů. Použití těchto modelů vede jen k malému navýšení správných řešení úloh (úloha č. 8). V tomto případě se jedná o vliv uhlovodíkového zbytku na stejnou charakteristickou skupinu. Tento efekt je však promítán do vlastnosti sloučeniny (bazicita). Vzhledem k tomu, že v tomto případě jde o zprostředkovaný poznatek studia molekulárních modelů, nevykazuje žádoucí efekt. Řešení úlohy bez použití modelů i s jejich použitím vede v podstatě ke srovnatelným výsledkům. Vhodná příprava respondentů směřující k interpretaci zprostředkovaných poznatků však může pozitivně ovlivnit řešení tohoto typu úloh.

Výsledky zkoumání aplikací molekulárních modelů ve výuce organické chemie ukázaly na nezpochybnitelný význam modelů pro zkvalitnění výuky. K vyžití modelů je však třeba přistupovat kriticky, protože ne vždy se dostaví očekávaný pozitivní efekt, pokud jde o pochopení a osvojování si učiva ve výuce na gymnáziu. Molekulární modely by měly zaujmout pozici neoddělitelné komponenty učiva chemie na všech stupních škol.

## 7 Literatura

1. BLÁHA, K., DRÁTOVSKÝ, M., PACHMANN, E., KORYTA, J.: *Pojmy obecné chemie na základní a střední škole*. 1. vyd. Praha : ÚÚVPP, 1985. 101 s.
2. KOLÁŘ, K., HELLBERG, J.: *Vzorce v organické chemii*. 1. vyd. Hradec Králové : KPÚ, 1989. 30 s.
3. BLAŽEK, J., FLEMR, V., KOLÁŘ, K., LIŠKA, F., ZEMÁNEK, F.: *Přehled chemického názvosloví*. 1. vyd. Praha : SPN, 2004. 144 s. ISBN 80-7235-260-1.
4. PACHMANN, E.: *Speciální didaktika chemie*. 1. vyd. Praha : SPN, 1986. 350 s.
5. SZEROMSKI, T.: *Modele i modelowanie w nauczaniu chemii*. 1. vyd. Warszawa : WSP, 1982. 120 s. ISBN 83-02-00103-1.
6. REMKO, M.: *Molekulové modelovanie*. 1. vyd. Bratislava : SAP, 2000. 240 s. ISBN 80-88908-62-0.
7. CASANOVA, J.: Computer-Based Molecular Modeling in the Curriculum. *Journal of Chemical Education*. May 1993, vol. 70, no. 11, s. 904-909.
8. HEIMGÄRTNER, H.: Didaktische Überlegungen zur Moleküldarstellung am PC. *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*. 1995, jg. 6, nr. 28, s. 36-38.
9. SCHICKOR, H.: Bau und Präsentation von 3D-Molekülanimationen. *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*. 2002, jg. 13, nr. 67, s. 41-44.
10. OPHART, Ch. E.: Chemical Education: Software. *Journal of Chemical Education*. March 1996, vol. 73, no. 3, s. 246-247.
11. DORLAND, L.: News from Online: What's New with Chime? *Journal of Chemical Education*. July 2002, vol. 79, no. 7, s. 778-782.
12. WHITNELL, R. M., FERNANDES, E. A., LOVE, J. C.: Multimedia Chemistry Lectures. *Journal of Chemical Education*. September 1994, vol. 71, no. 9, s. 721-725.
13. CLARK, T.: Molecular Modeling. *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*. 1997, jg. 8, nr. 38, s. 15-17.
14. SHUSTERMAN, G. P., SHUSTERMAN, A. J.: Teaching Chemistry with Electron Density Models. *Journal of Chemical Education*. July 1997, vol. 74, no. 7, s. 771-776.

15. STEINER, D.: Molecular Modelling im Unterricht - eine ergänzende Spielerei oder eine didaktische Herausforderung? *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*. 1997, jg. 8, nr. 38, s. 18-23.
16. STEINER, D.: PC-Spartan - Ein Blick in die Welt der Moleküle. *Naturwissenschaften im Unterricht Chemie*. 1997, jg. 8, nr. 42, s. 44-45.
17. STEINER, D.: Neue Medien - andere Methoden. *Praxis der Naturwissenschaften Chemie in der Schule*. 2003, jg. 52, nr. 76/77, s. 76-79.
18. STEINER, D.: Molecular Modelling mittels Elektronendichteoberflächen. *Praxis der Naturwissenschaften Chemie in der Schule*. 1999, jg. 48, nr. 48, s. 38-42.
19. STEINER, D.: Molecular Modelling als multimediales Lehrmaterial. *Praxis der Naturwissenschaften Chemie in der Schule*. 1999, jg. 48, nr. 50, s. 17-19.
20. STEINER, D.: *Virtuelle Experimente mittels molekular modelling. Lehrerfortbildung*. Nürnberg : UEN, 2004. 110 s.
21. JONES, M. B.: Molecular Modeling in the Undergraduate Chemistry Curriculum. *Journal of Chemical Education*. July 2001, vol. 78, no. 7, s. 867-868.
22. BARNICKEL, G.: Molecular Modelling - von der Theorie zur Wirklichkeit. *Chemie in unserer Zeit*. 1995, jg. 29, nr. 4, s. 176-184.
23. HEHRE, W. J., SHUSTERMAN, A. J., NELSON, J. E.: *The Molecular Modeling Workbook for Organic Chemistry*. Irvine : CA Wavefunction, 1998. 322 s. ISBN 1-890661-06-6.
24. FORESMAN, B., FRISCH, A.: *Exploring Chemistry with Elektronic Structure Methods*. 2nd edition. Pittsburgh : PA Gaussian, 1996. 241 s. ISBN 0-9636769-3-8.
25. HELLBERG, J., BÍLEK, M.: *K současnému stavu a vývojovým tendencím výuky chemii ve vybraných zemích Evropské unie*. 1. vyd. Hradec Králové : Gaudeamus, 2000. 156 s. ISBN 80-7041-795-1.
26. KOLÁŘ, K., KODÍČEK, M., POSPÍŠIL, J.: *Chemie II (organická a biochemie) pro gymnázia*. 2. vyd. Praha : SPN, 2005. 128 s. ISBN 80-7235-283-0.
27. PACÁK, J. a kol.: *Chemie pro II. ročník gymnázií*. 1. vyd. Praha : SPN, 1985. 214 s.
28. HONZA, J., MAREČEK, A.: *Chemie pro čtyřletá gymnázia - 2.díl*. 2. přeprac. vyd. Olomouc : Nakladatelství Olomouc, 1998. 231 s. ISBN 80-7182-056-3.
29. HONZA, J., MAREČEK, A.: *Chemie pro čtyřletá gymnázia - 3.díl*. 1. vyd. Olomouc : Nakladatelství Olomouc, 2000. 250 s. ISBN 80-7182-057-1.
30. KUBOVÝ, A.: *Základy kvantové mechaniky*. 1. vyd. Hradec Králové : Gaudeamus, 1996. ISBN 80-7041-781-1.

31. ZAHRADNÍK, R., POLÁK, R.: *Základy kvantové chemie*. 1. vyd. Praha : SNTL, 1976. 437 s.
32. HEHRE, W. J., YU, J., LOU, L., KLUNZINGER, P. E.: *A Brief Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*. Irvine : CA Wavefunction, 1998. 358 s. ISBN 1-890661-05-8.
33. HEHRE, W. J.: *A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemistry Calculations*. Irvine : CA Wavefunction, 2003. 812 s. ISBN 1-890661-18-X.
34. MYŠKA, K., KOLÁŘ, K.: Počítačové modelování ve výuce chemie. In *Aktuální otázky výuky chemie IX.*, Hradec Králové : Gaudeamus, 2000. s. 241-244.
35. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K.: Grafické modely molekul a jejich význam ve výuce chemie. In *8. Pražská konference o kybernetické pedagogice. Kybernetické modely ve vzdělávání a mezilidské komunikaci*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2000. s. 39.
36. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K.: Využití počítačových modelů organických sloučenin ve výuce chemie. *Chemické Listy*. 2000, roč. 94, č. 9, s. 1022.
37. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K.: Znázornění struktury organických sloučenin pomocí „elektron density models“. In *Aktualne problemy edukacji chemicznej*. Opole : Uniwersytet Opolski, 2000. s. 19-20.
38. MYŠKA, K., KOLÁŘ, K.: Počítačové programy pro přípravu grafických podkladů ve výuce chemie. *Biologie-Chemie-Zeměpis*. 2001, roč. 10, č. 4, s. 27-28.
39. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K.: Využití programu PC Spartan Pro v učivu o vazbách v organických sloučeninách. *Biologie-Chemie-Zeměpis*. 2001, roč. 10, č. 5, s. 230-232.
40. MYŠKA, K.: *Informační technologie ve výuce chemie*. Dizertační práce. Banská Bystrica : FPV UMB, Katedra chemie, 2002.
41. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K., TOMEČEK, O.: Demonstration of Molecular Structure by Computational Methods. *Didactics of Science and Technical Subjects*. 2003, vol. 2, s. 83-85.
42. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K.: Molekulární modely ve výuce chemie. In *Informační technologie ve výuce chemie*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2004. s. 27-30.
43. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K., DOSTÁL, H.: Výběr učiva organické chemie pro počítačovou prezentaci. *Acta Facultatis Paedagogicae Universitatis Tyrnaviensis*. 2005, Ser. D, Suppl. 1, s. 119-122.
44. *Introduction to Spartan (Includes CD-ROM)*, Irvine : CA Wavefunction, 1999. 14 s.

45. HEHRE, W. J., DEPPMEIER, B. J., KLUNZINGER, P. E.: *A PC Spartan Pro Tutorial*. Irvine : CA Wavefunction, 1999. 126 s. ISBN 1-890661-08-2.
46. *PC Spartan Pro User's Guide*. Irvine : CA Wavefunction, 1999. 108 s. ISBN 1-890661-09-0.
47. *Spartan'08 for Windows, Macintosh and Linux User's Guide and Tutorial*. Irvine : CA Wavefunction, 2008. 459 s. ISBN 978-1-890661-38-4.
48. HEHRE, W. J., JOHNSON, J. A., KLUNZINGER, P. E.: *A Mac Spartan Pro / Mac Spartan Plus (version 2.0) Tutorial*. Irvine : CA Wavefunction, 2000. 128 s. ISBN 1-890661-16-3.
49. *Mac Spartan Pro / Mac Spartan Plus (version 2.0) User's Guide*. Irvine : CA Wavefunction, 2000. 116 s. ISBN 1-890661-14-7.
50. *Introduction to Titan (Includes CD-ROM)*, Irvine : CA Wavefunction, 1999. 11 s.
51. Mobile HyperChem Free [on-line]. Appato, ©2012. [vid. 2013-2-18]. Obrázky ve formátu GIF. Dostupné z: <http://cdn1.appato.com/hypercube-inc/mobile-hyperchem-free/screenshot/0> a <http://cdn2.appato.com/hypercube-inc/mobile-hyperchem-free/screenshot/1>.
52. BYČKOVSKÝ, P.: *Základy měření výsledků výuky. Tvorba didaktického testu*. Praha: ČVUT, 1982. 149 s.
53. GAVORA, P.: *Úvod do pedagogického výzkumu*. 1. vyd. Brno: Paido, 2000. 207 s. ISBN 80-85931-79-6.
54. CHRÁSKA, M.: *Didaktické testy: příručka pro učitele a studenty učitelství*. 1. vyd. Brno: Paido, 1999. 91 s. ISBN 80-85931-68-0.
55. GAVORA, P.: *Výzkumné metody v pedagogice*. 1. vyd. Brno: Paido, 1996. 130 s. ISBN 80-85931-15-X.
56. GAVORA, P.: *Metody pedagogického výzkumu*. 1. vyd. Praha: Grada Publishing, 2007. 272 s. ISBN 978-80-247-1369-4.
57. SKALKOVÁ, J.: *Obecná didaktika*. 1. vyd. Praha: ISV, 1999. 292 s. ISBN 80-85866-33-1.
58. PRŮCHA, J.: *Moderní pedagogika*. 2. přeprac. a aktualiz. vyd. Praha: Portál, 2002. 481 s. ISBN 80-7178-631-4.

## 8 Publikace a další výstupy autora vztahující se k řešené problematice

1. KOLÁŘ, K., DOLEŽAL, R., MYŠKA, K., MAREK, M.: Počítačové modelování reaktivity ve výuce chemie. In *Badania w Dydaktyce Chemii*. Kraków : WNAP, 2004. s. 111-114.
2. MAREK, M.: *Zobrazování struktur sloučenin ve výuce chemie na ZŠ a SŠ*. Písemná práce k dizertační zkoušce. Banská Bystrica : FPV UMB, Katedra chemie, 2004.
3. MAREK, M.: Možnosti využití počítačových modelů ve výuce chemie na základních školách a gymnáziích. In *Modelování ve výuce chemie*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2005. s. 79-81.
4. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K., DOLEŽAL, R., MAREK, M., TOMEČEK, O.: Počítačové modely průběhu nukleofilní alifatické substituce. In *Modelování ve výuce chemie*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2005. s. 95-102.
5. MAREK, M., MYŠKA, K., KOLÁŘ, K.: Současné povědomí žáků a studentů o chemických vzorcích a modelech. In *Aktuální otázky výuky chemie XV*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2005. s. 112-116.
6. MYŠKA, K., KOLÁŘ, K., MAREK, M.: Softwarové prostředky využívané ve výuce chemie. In *Aktuální otázky výuky chemie XV*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2005. s. 322-324.
7. MAREK, M., MYŠKA, K., KOLÁŘ, K.: Využití vzorců a modelů ve výuce chemie. *ChemZi*. 2005, roč. 1, č. 1, s. 97-98.
8. MYŠKA, K., KOLÁŘ, K., MAREK, M.: Vizualizace řešení vybraných úloh z chemie pomocí molekulárních modelů. *ChemZi*. 2005, roč. 1, č. 1, s. 251.
9. KOLÁŘ, K., MAREK, M., MYŠKA, K.: Vzorce a modely ve výuce chemie na základní škole. In *Acta Facultatis Paedagogicae Universitatis Tyrnaviensis*. Trnava : TU, 2005. s. 325-327.
10. MAREK, M., MYŠKA, K., KOLÁŘ, K.: Počítačové modely ve výuce chemie na základní škole. In *Aktuální aspekty pregraduální přípravy a postgraduálního vzdělávání učitelů chemie*. Ostrava : UO, 2006. s. 234-236.
11. KOLÁŘ, K., MAREK, M., MYŠKA, K.: Postoje žáků a studentů k využívání počítačových modelů na základní a střední škole. In *Badania w dydaktyce przedmiotów przyrodniczych*. Kraków : AP, 2006. s. 200-201.



12. MAREK, M., MYŠKA, K., KOLÁŘ, K.: Zkušenosti s využitím počítačových modelů ve výuce chemie na ZŠ a gymnáziu. In *Soudobé trendy v chemickém vzdělávání. Aktuální otázky výuky chemie XVI*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2006. s. 138-141.
13. MYŠKA, K., KOLÁŘ, K., MAREK, M.: *Vzorce, modely a počítačová grafika ve výuce chemie*. 1. vyd. Hradec Králové : Gaudeamus, 2006. 76 s. ISBN 80-7041-979-2.
14. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K., DOLEŽAL, R., MAREK, M.: *Počítačové modely ve výuce chemie*. 1. vyd. Hradec Králové : Gaudeamus, 2006. 74 s. ISBN 80-7041-991-1.
15. BÍLEK, M., MAREK, M., ZEMANOVÁ, M., KMEŤOVÁ, J., VACULČÍKOVÁ, D., CIEŠLA, P., NODZYŃSKA, M., PAŠKO, I., PAŠKO, R.: Badanie umiejetności tworzenia modeli strukturalnych substancji o budowie jonowej przez uczniów wyższych klas szkół podstawowych, In *Soudobé trendy v chemickém vzdělávání. Aktuální otázky výuky chemie XVI*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2006. s. 146-153.
16. MAREK, M.: Využití počítačových modelů při výuce chemie na základní škole a gymnáziu, In *Význam chemie v životě společnosti. Aktuální otázky výuky chemie XVII*. Hradec Králové : Gaudeamus, 2008. s. 92-96.
17. MAREK, M.: *Molekulární modely ve výuce chemie na základní škole a gymnáziu*. Dizertační práce. Banská Bystrica : FPV UMB, Katedra chemie, 2008.
18. MAREK, M., KOLÁŘ, K., MYŠKA, K.: Teaching of chemistry on primary school and secondary school with using of the molecular models. In *III. International conference Research in didactics of the science. Book of abstracts*. Kraków : Pedagogical University, 2008. s. 28.
19. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K., MAREK, M., CUPÁKOVÁ, B.: Computer models of conjugated systems in organic chemistry education. In *51. Zjazd Polskiego towarzystwa chemicznego oraz Stowarzyszenia inżynierów i techników przemysłu chemicznego. Księga streszczeń*. Opole : PTCh-SITPCh-UO, 2008. s. 217.
20. MAREK, M., KOLÁŘ, K., MYŠKA, K.: Výuka chemie na základní škole a gymnáziu s využitím molekulárních modelů. In *Badania w dydaktyce przedmiotów przyrodniczych*. Kraków : Uniwersytet Pedagogiczny im KEN, 2008. s. 253-257.
21. KOLÁŘ, K., MYŠKA, K., CUPÁKOVÁ, B., MAREK, M.: Znázornění konjugace v organických sloučeninách pomocí molekulárních modelů. In *Súčasnosc' a perspektyvy didaktiky chémie II*. Banská Bystrica : FPV UMB, 2009. s. 27-31.
22. MAREK, M., MYŠKA, K., KOLÁŘ, K.: Využití molekulárních modelů v úlohách z organické chemie na gymnáziu. *Media4u Magazine* [online]. X3/2010, roč. 7, s. 21-24. Dostupné z <<http://www.media4u.cz/>>. ISSN 1214-9187.

23. MAREK, M., MYŠKA, K., KOLÁŘ. K.: Úlohy z organické chemie na gymnáziu – molekulární modely a reaktivita sloučenin. *Media4u Magazíne* [online]. X3/2011, roč. 8, s. 81-84. Dostupné z <<http://www.media4u.cz/>>. ISSN 1214-9187.
24. MAREK, M., KOLÁŘ. K., MYŠKA, K.: Úlohy z organické chemie na gymnáziu – molekulární modely a reaktivita sloučenin II. *Media4u Magazíne* [online]. X4/2012, roč. 9, s. 39-41. Dostupné z <<http://www.media4u.cz/>>. ISSN 1214-9187.

## 9 Seznam obrázků

obr. 1 - Trubičkový model molekuly cyklohexanu .....	8
obr. 2 - Kuličkový model molekuly ethanu.....	8
obr. 3 - Kalotový model molekuly benzenu .....	9
obr. 4 - Model krystalové struktury oxidu uhličitého.....	9
obr. 5 - Skeletální modely benzenu (trubičkový, kuličkový, kalotový).....	10
obr. 6 - Kvantově-mechanické modely molekuly cyklohexylaminu a anilinu    zobrazující elektronovou hustotu pomocí barevné škály .....	11
obr. 7 - Použití perspektivní projekce v učebnici chemie pro gymnázia [27].....	12
obr. 8 - Fotografie kalotového modelu molekuly cyklohexanu v učebnici chemie pro gymnázia [26].....	13
obr. 9 - Příklad obrázku kuličkového modelu v učebnici chemie pro gymnázia [26] .....	13
obr. 10 - Příklad použití molekulárních modelů v učebnici chemie pro gymnázia (modely ethanu, ethenu a ethynu) [26] .....	15
obr. 11 - Vizualizace molekulárních modelů pomocí tabletu a mobilního telefonu [51] .....	20
obr. 12 - Modely molekuly chlormethanu (Wire, Ball and Wire, Tube, Ball and Spoke, Space Filling).....	21
obr. 13 - Jiné možnosti zobrazení molekuly chlormethanu (Single Point Energy, Density Functional, SVWN/DN*, PM3) .....	21
obr. 14 - Fáze výzkumu s informací o počtech respondentů.....	27
obr. 15 - Příklad využití sloupcového grafu v pedagogickém výzkumu.....	30

## 10 Přílohy

Příloha 1 – Přehled vzorců a modelů

Příloha 2 – Nástěnné transparenty modelů jednodušších uhlovodíků a jejich derivátů

Příloha 3 – Manuál k programu PC Spartan Pro – základní instruktáž

Příloha 4 – Výukový CD-ROM

Příloha 5 – Manuál k výukovému CD-ROMu

Příloha 6 – Výskyt a pojmenování vzorců a modelů v učebnicích chemie pro gymnázia

Příloha 7 – TEST 1 – Výzkum 1

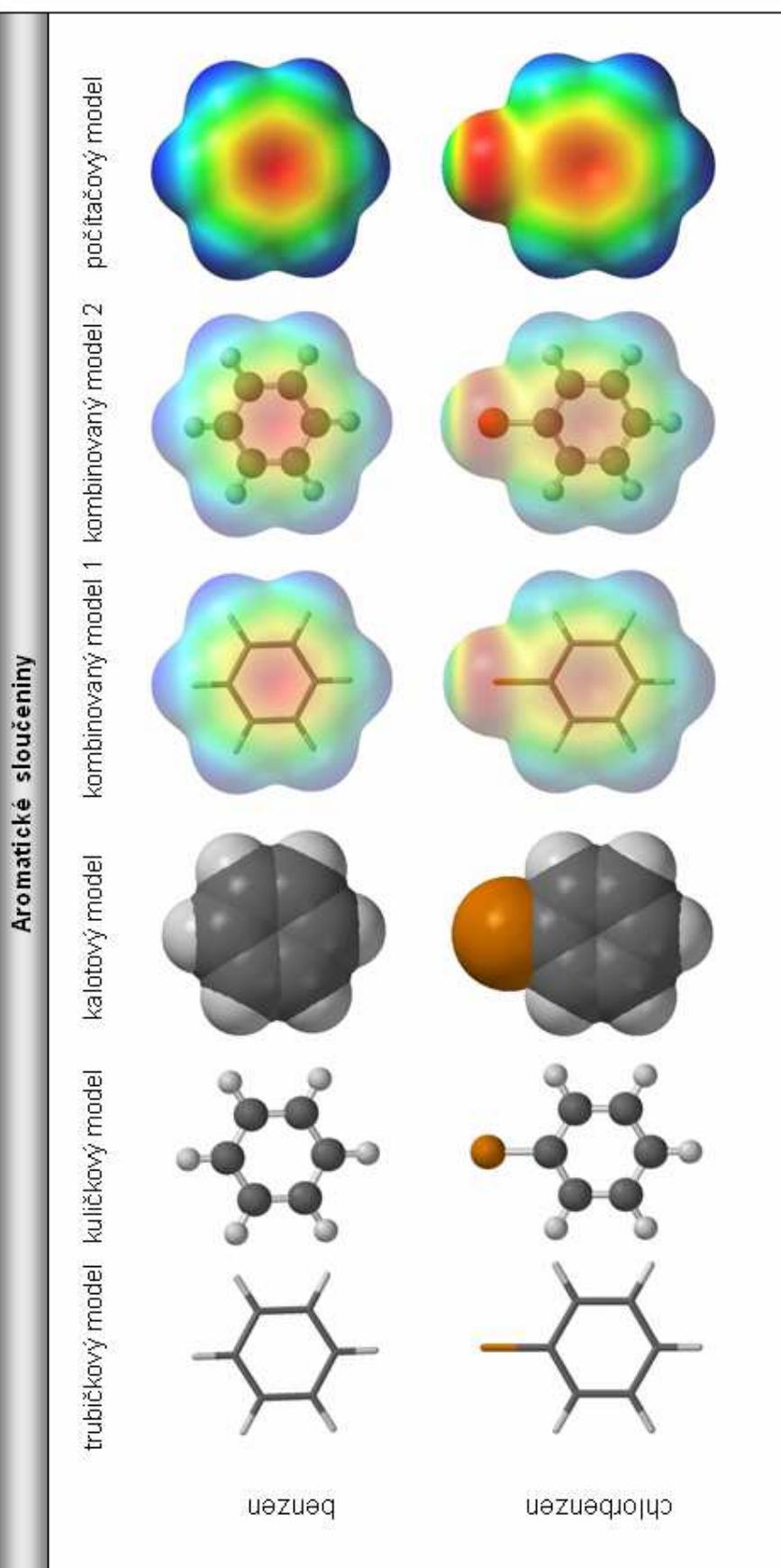
Příloha 8 – TEST 2 – Výzkum 2

Příloha 9 – GRAFY – Výzkum 1

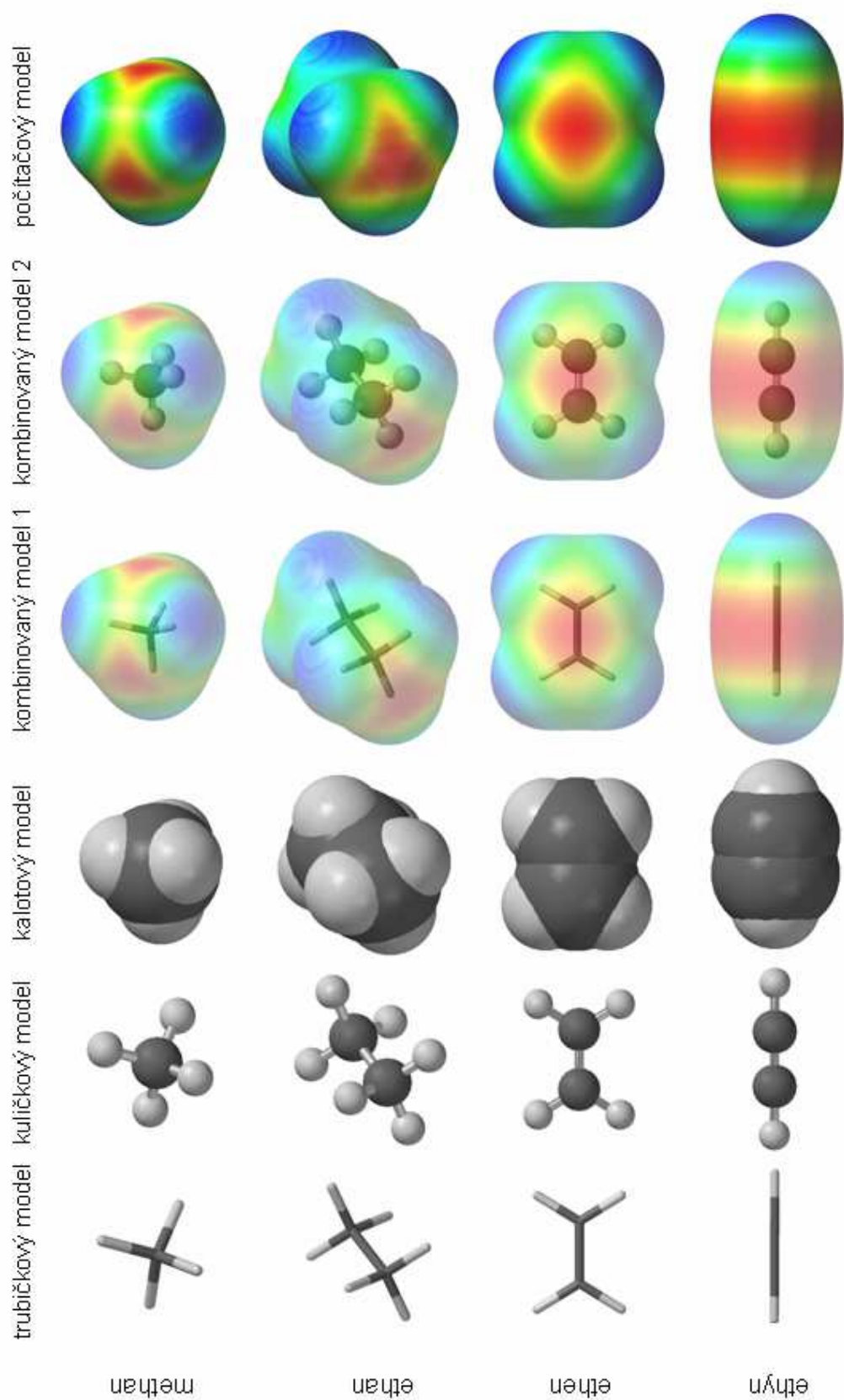
Příloha 10 – GRAFY – Výzkum 2

Příloha 11 – Ocenění – Počin roku za vysokoškolský učební text


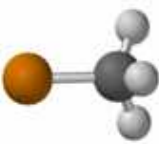
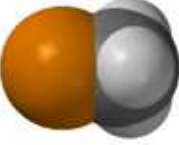
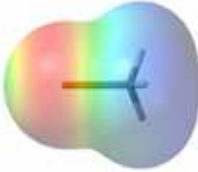
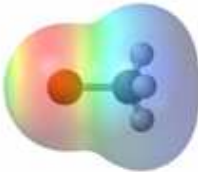




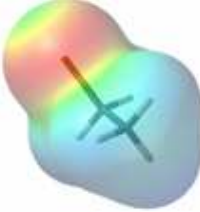
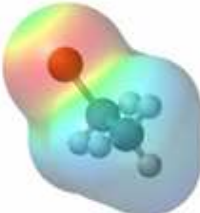
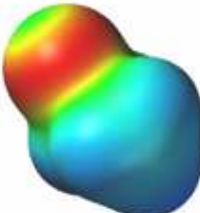



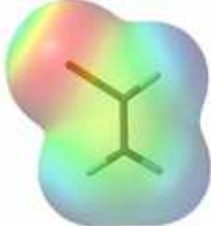
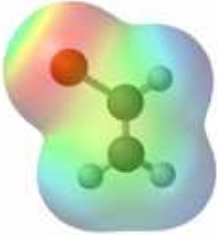
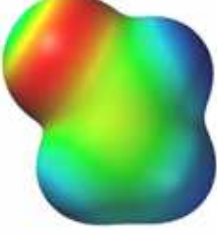










# Uhlovodíky

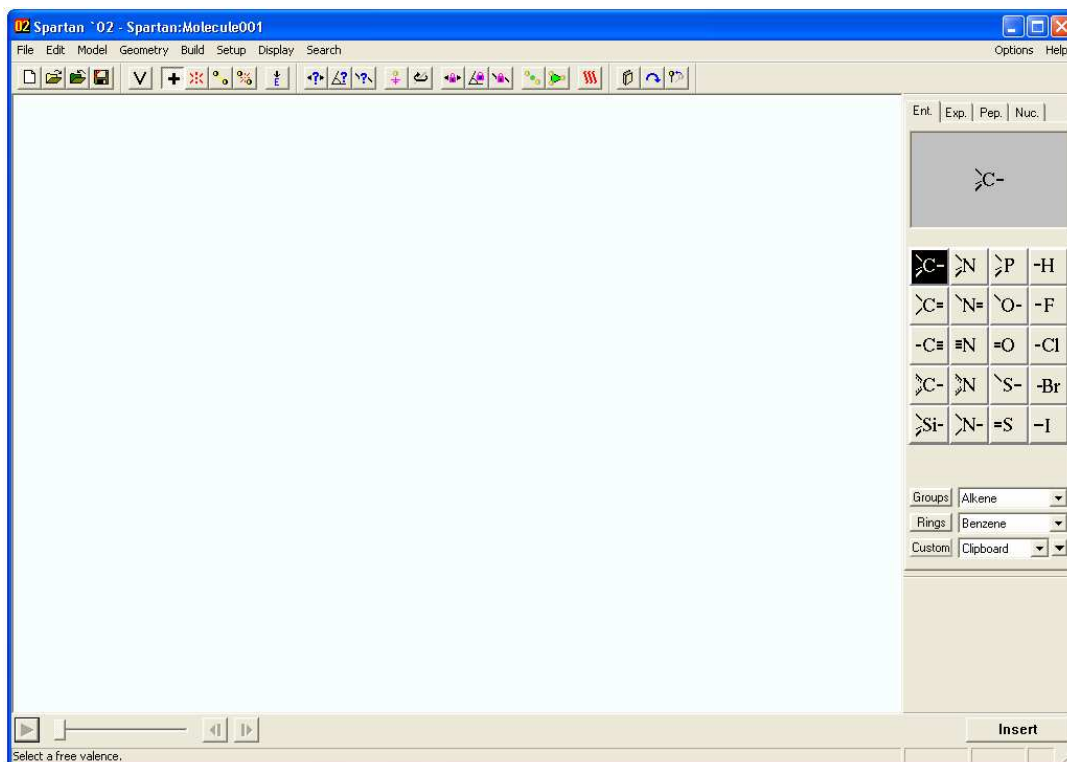


# Halogenderiváty uhlovodíků

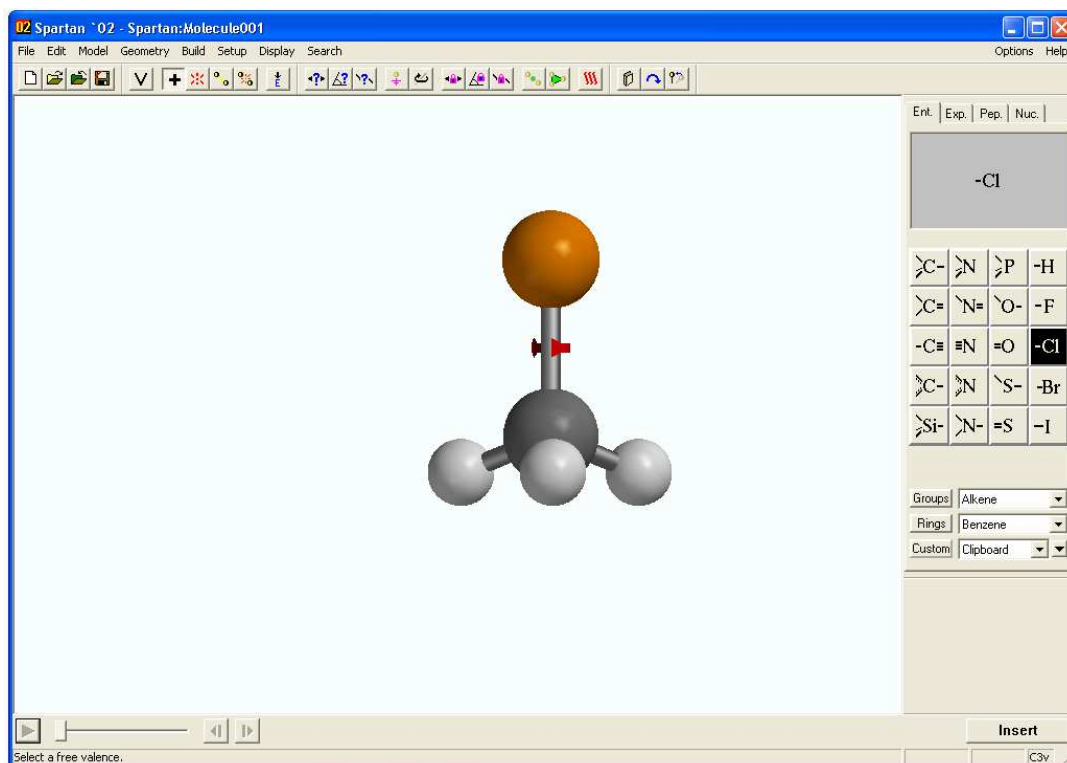
	trubičkový model	kuličkový model	kalotový model	kombinovaný model 1	kombinovaný model 2	počítačový model
chloroethan						
chloroethan						
chloroethen						
chloroethyn						



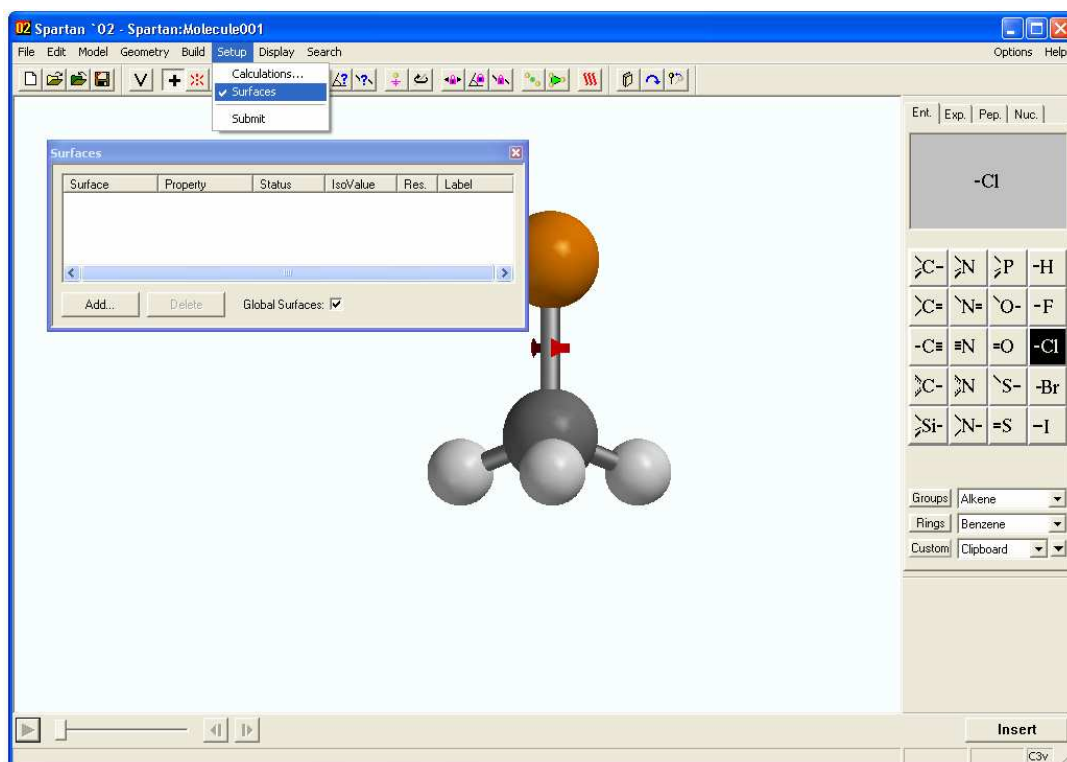
## 10.3 Příloha 3



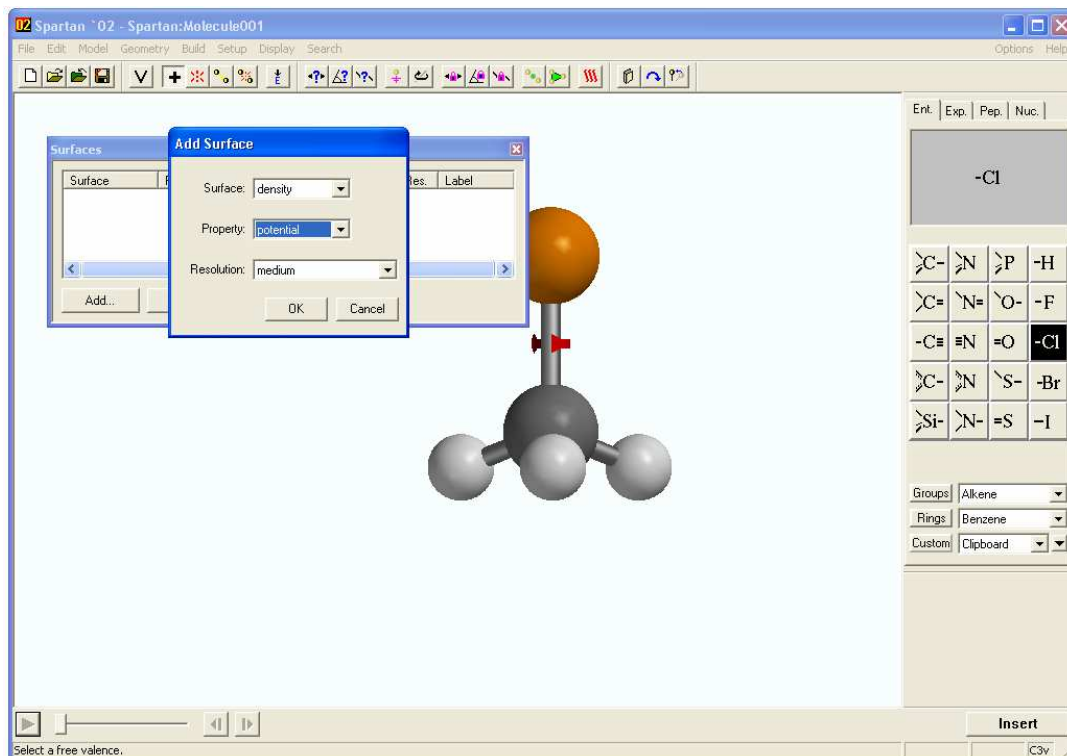
**Krok 1 a 2 - Otevření programu a panelu pro konstrukci molekul**



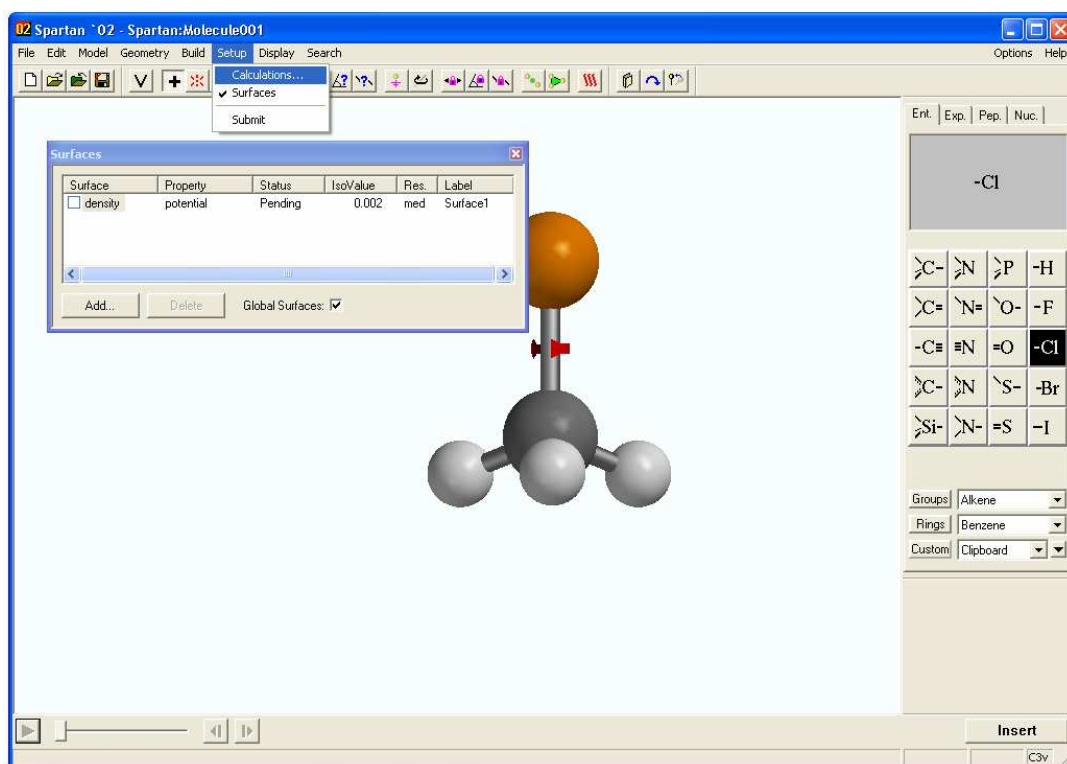
**Krok 3 - Konstrukce skeletálního modelu molekuly  $\text{CH}_3\text{-Cl}$**



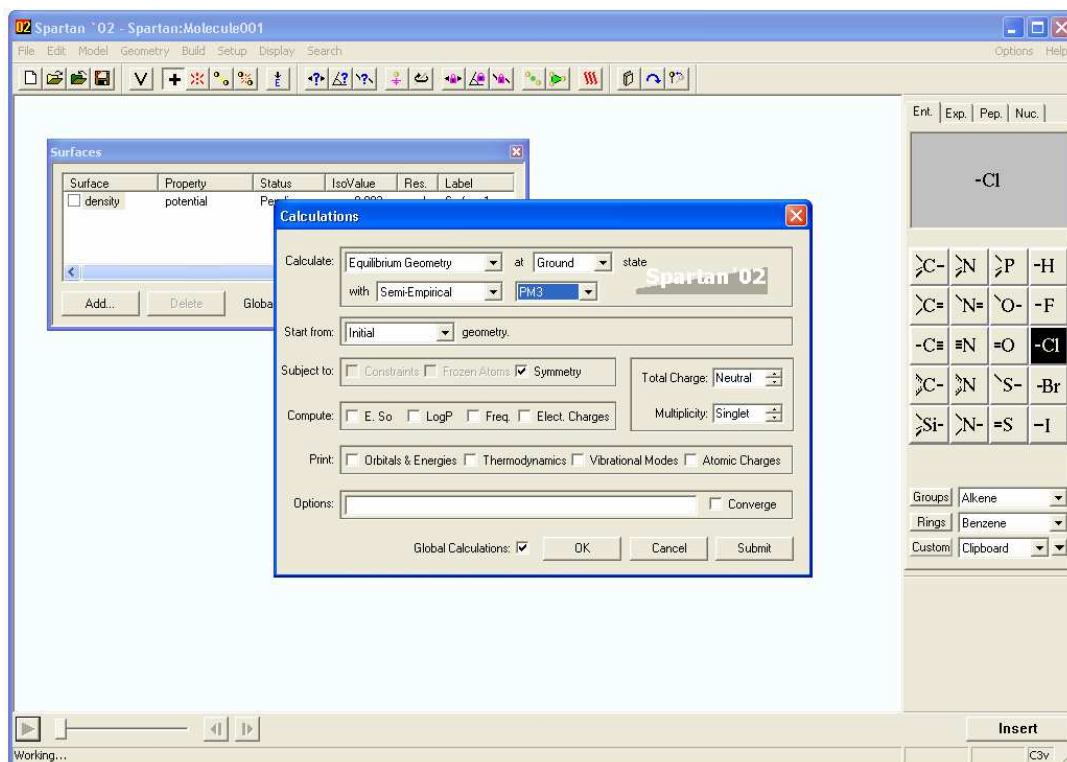
**Krok 4.a - Přidání „čtvrtého rozměru“ (povrchu - Surfaces) 1**



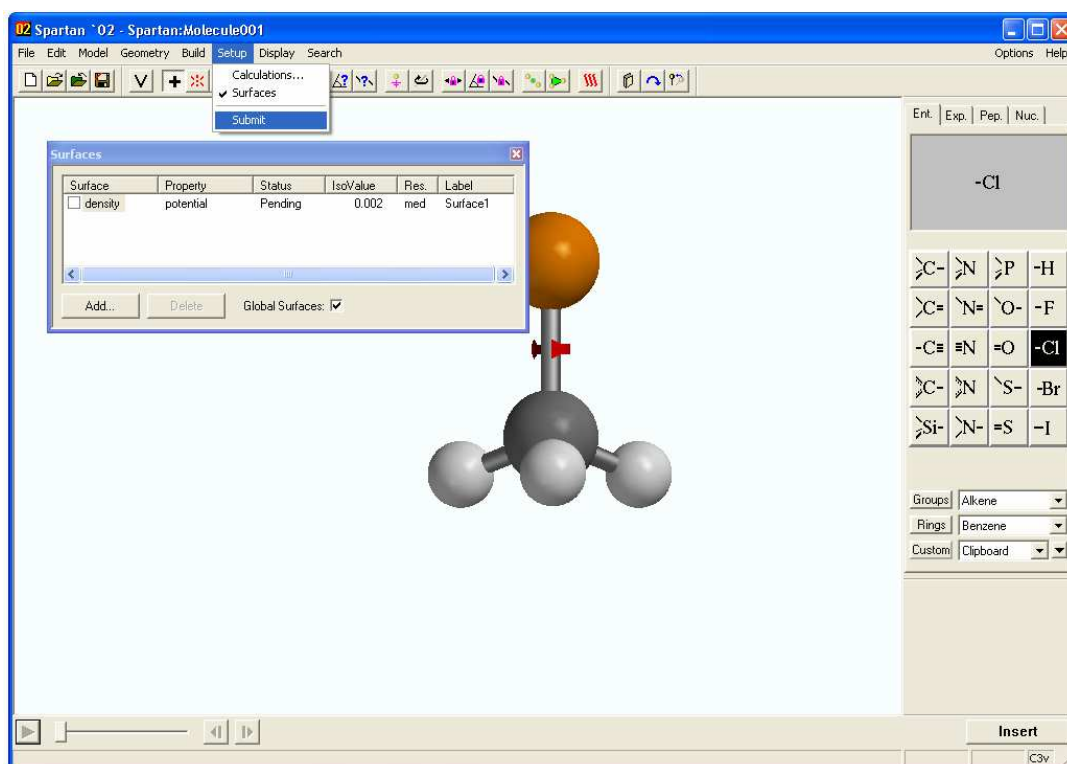
**Krok 4.b - Přidání „čtvrtého rozměru" (povrchu - Surfaces) 2**



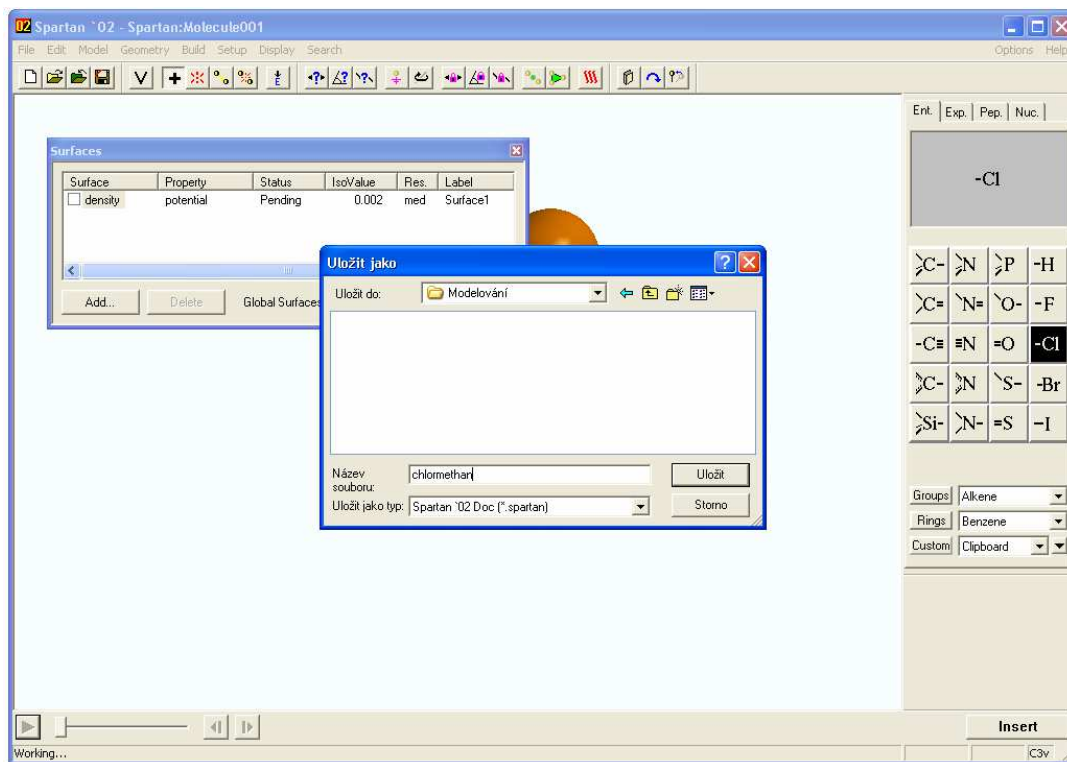
**Krok 5.a - Volba metody výpočtu 1**



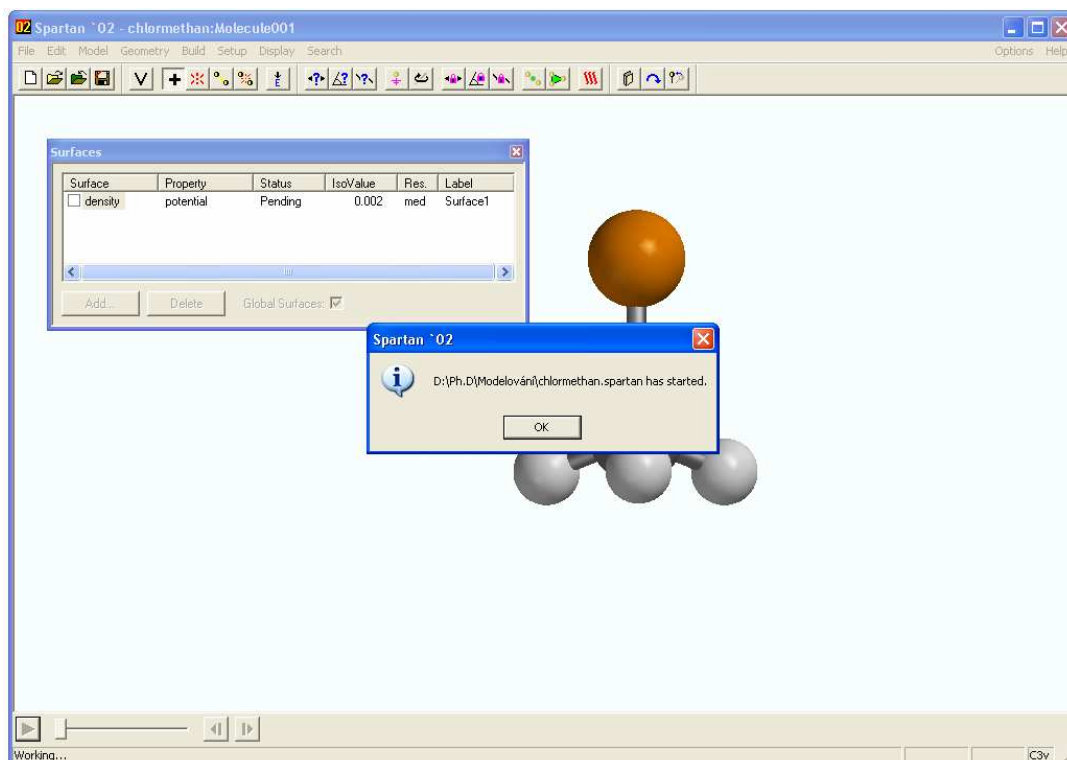
**Krok 5.b - Volba metody výpočtu 2**



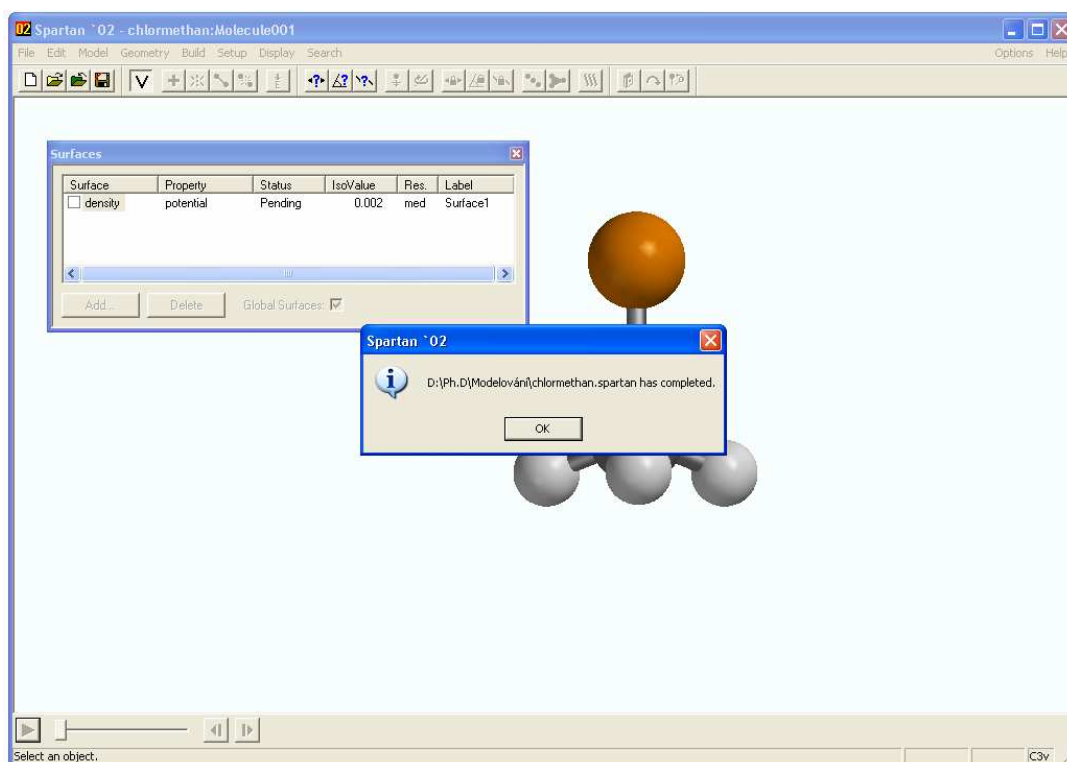
## Krok 6 - Zahájení výpočtu



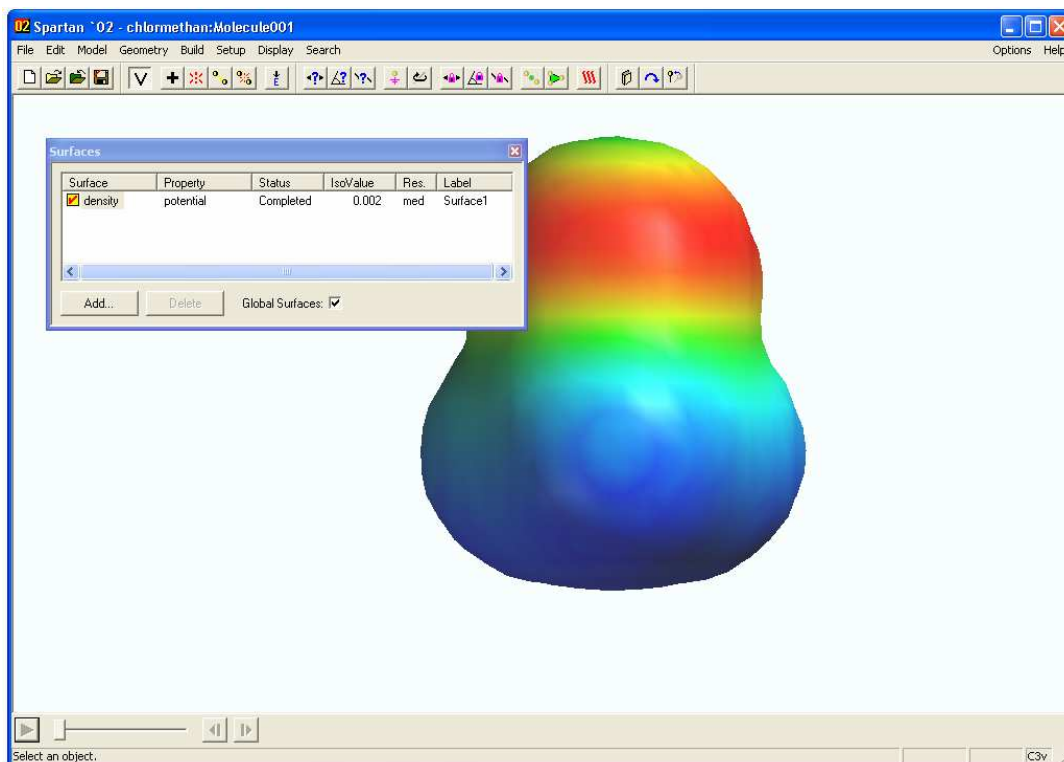
## Krok 7 - Určení místa uložení modelu



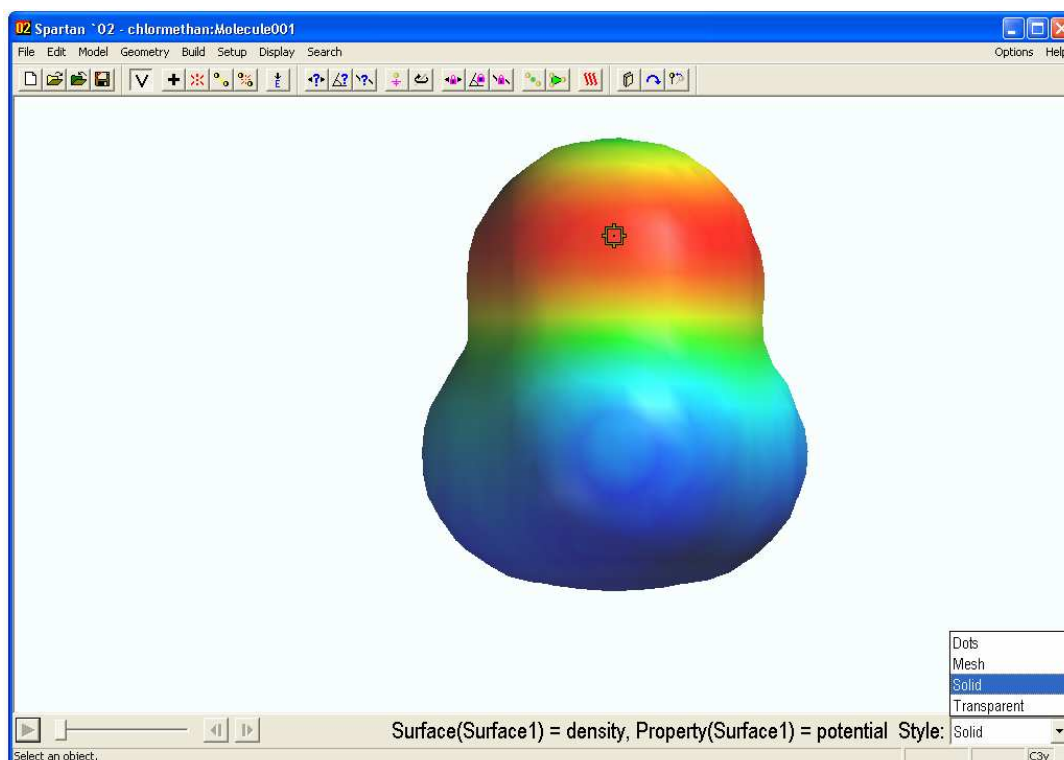
### Krok 8 - Potvrzení informace o zahájení výpočtu



### Krok 9 - Potvrzení informace o ukončení výpočtu

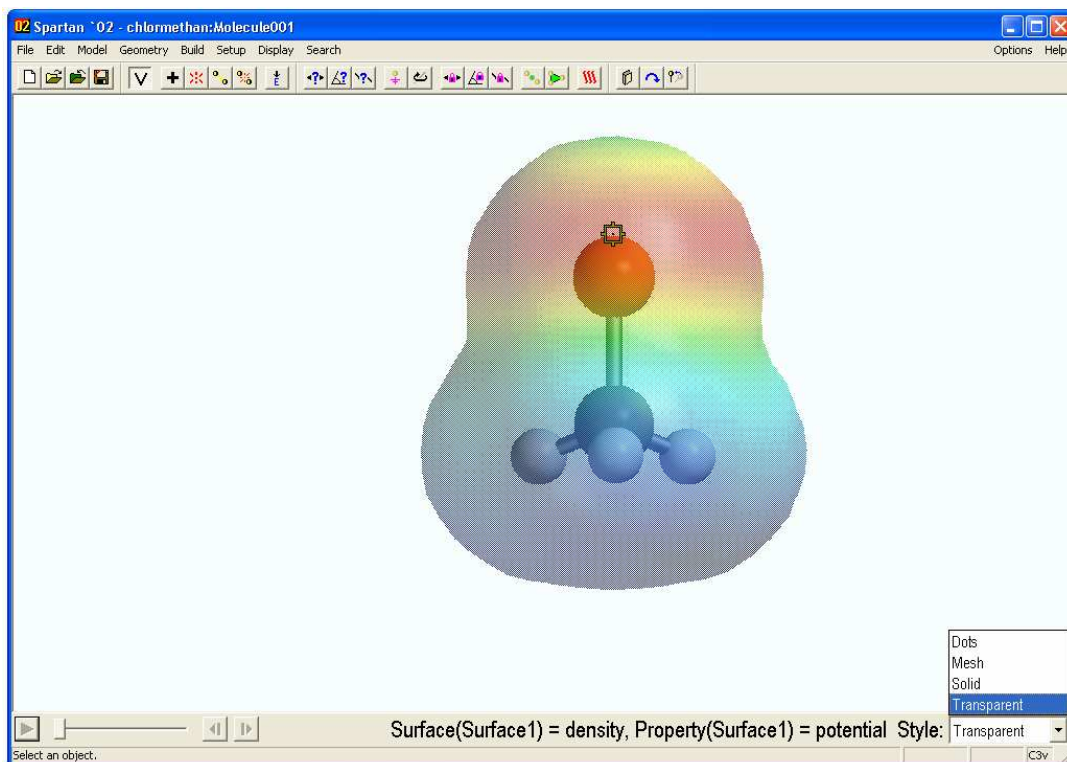


**Krok 10 - Zobrazení výsledného výpočtu povrchu**

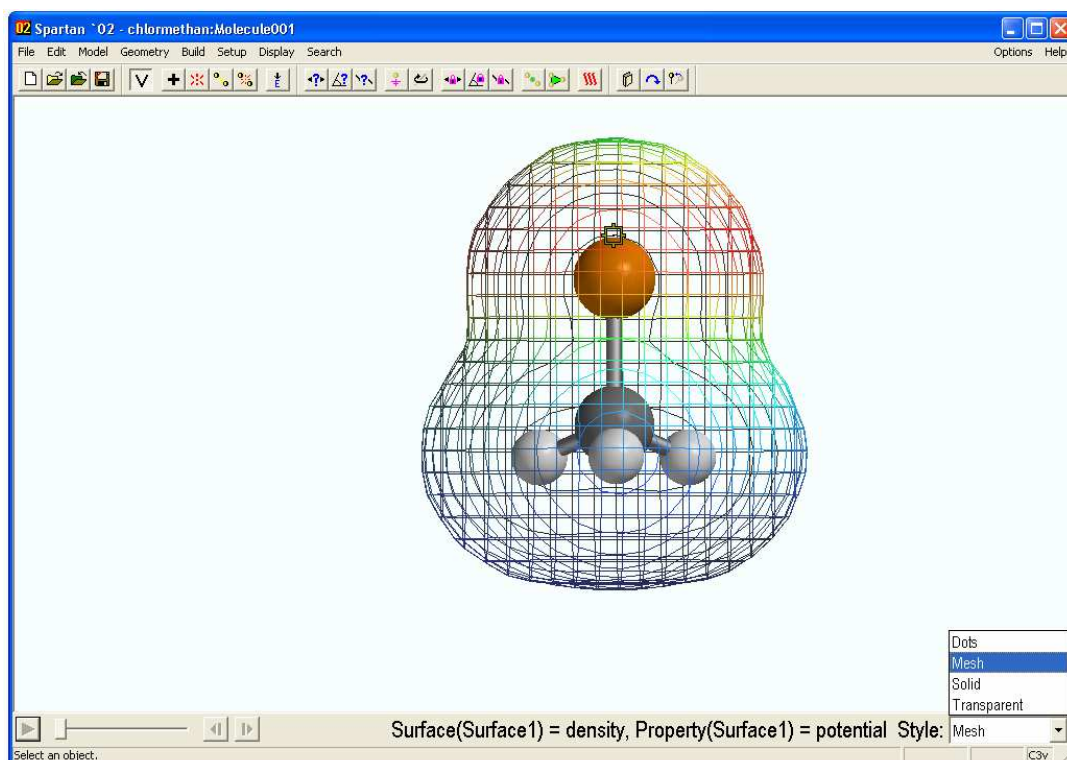


**Krok 11.a - Volba typu modelu (Solid)**



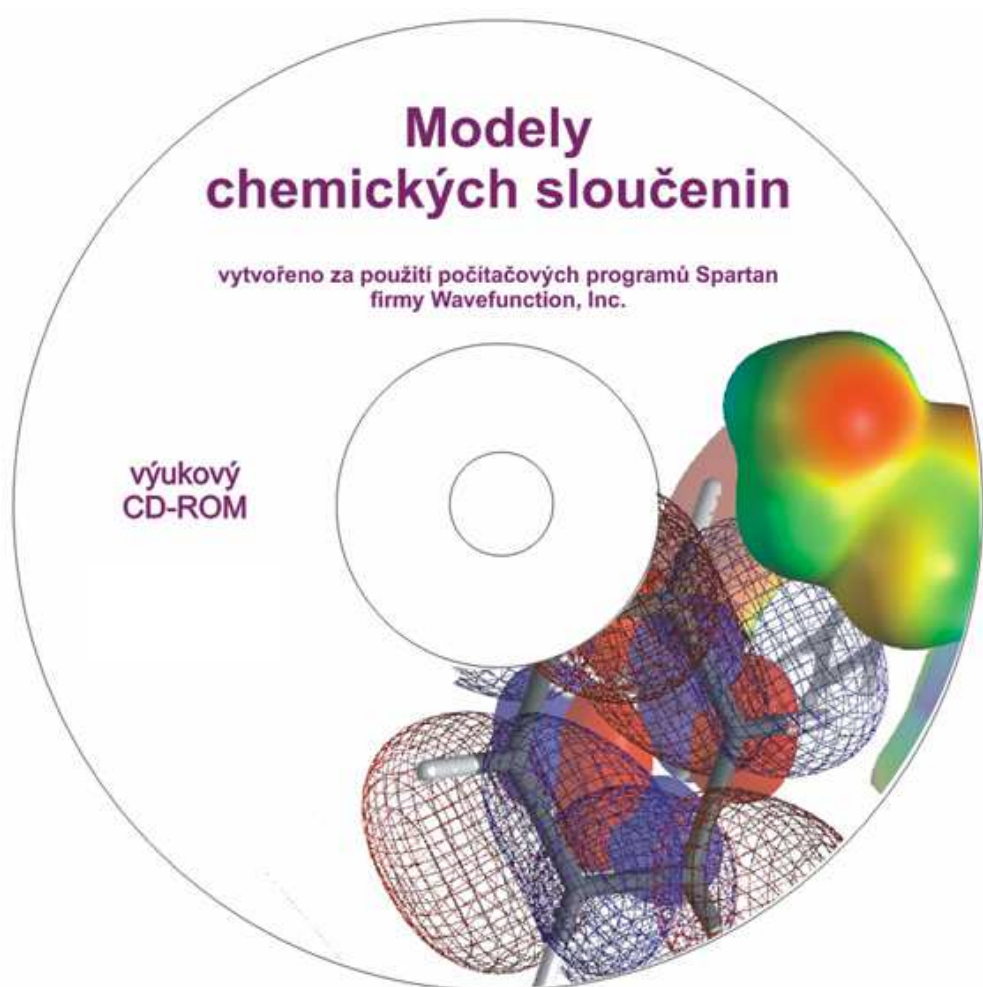


**Krok 11.b - Volba typu modelu (Transparent)**



**Krok 11.c - Volba typu modelu (Mesh)**

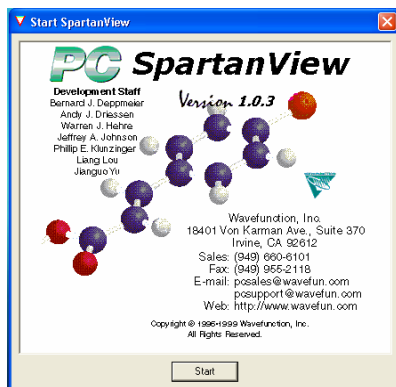
## VÝUKOVÝ CD-ROM



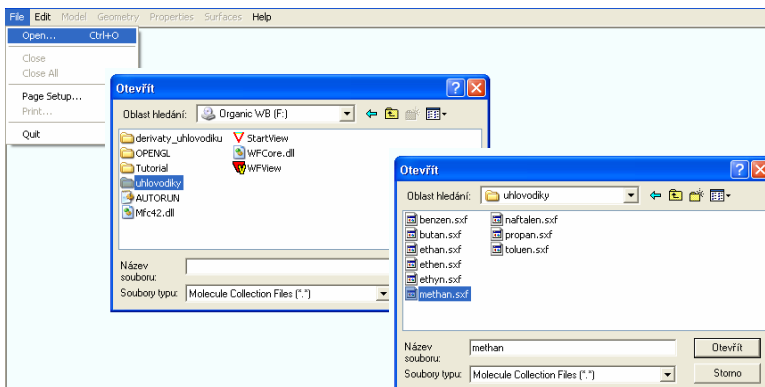


## Manuál (CD-ROM)

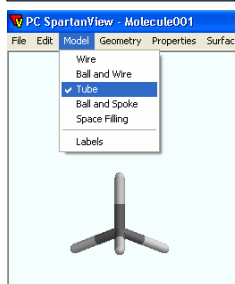
## Po načtení CD – kliknout na Start



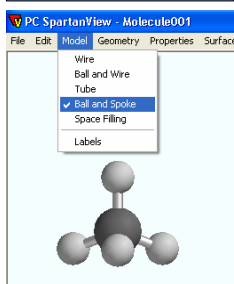
## Volba konkrétních uhlovodíků nebo jejich derivátů



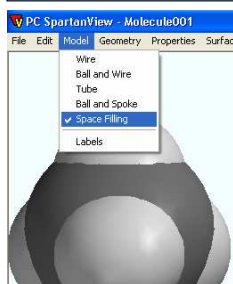
## Trubičkový model



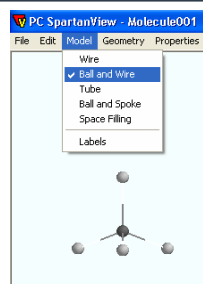
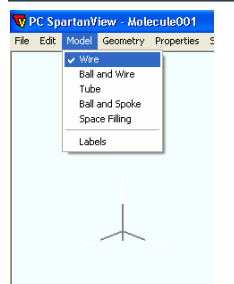
## Kuličkový model



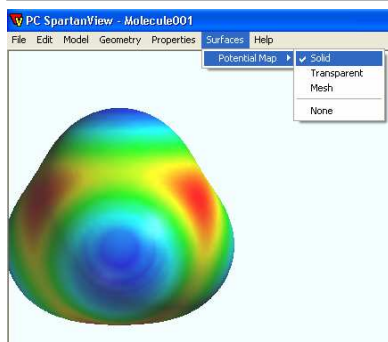
## Kalotový model



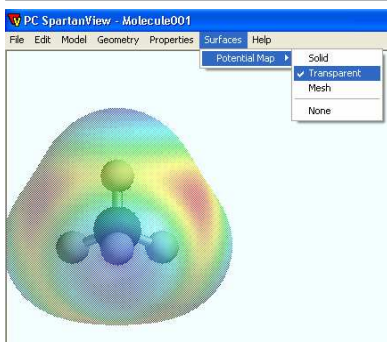
## Jiné modely



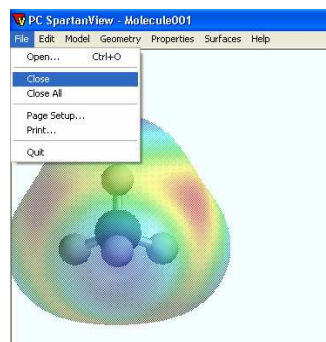
## Počítačový model



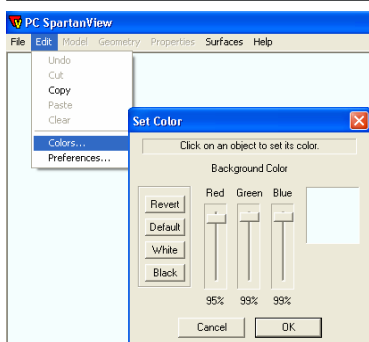
## Kombinovaný model



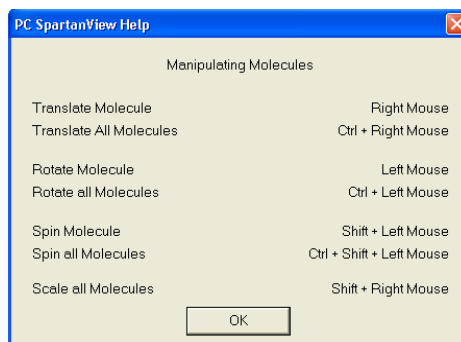
## Ukončení práce s modelem



## Editace barev (pozadí)



## Manipulace s molekulami



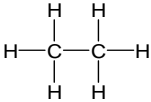
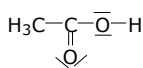

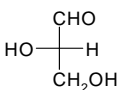
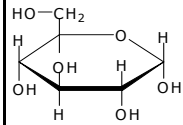
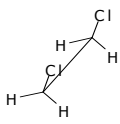
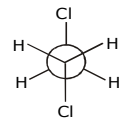
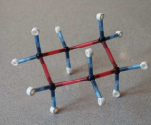


Přesouvání molekul(y)

Otáčení molekul(y)

Velikost molekul(y)

## 10.6 Příloha 6

### Výskyt a pojmenování vzorců a modelů v učebnicích pro gymnázia.

vzorce a modely	učebnice		
	uč. [30]	uč. [31]	uč. [32-33]
$C_2H_6$	souhrnný vzorec		
$H_3C-CH_3$	racionální vzorec		
	konstituční vzorec		
	elektronový vzorec		
	optické izomery, optické antipody		
			stereo-izomery, antipody
			
	konformace		perspektivní vzorec
			projekční vzorec
		tyčinkový model	
	kuličkový model	model	
	kalotový model		

**TEST 1**

<b>Fáze výzkumu</b>	<b>Typ školy</b>	<b>Označení testu (v této Příloze)</b>	<b>Označení grafu (v Příloze 9)</b>
Výzkum 1	Gymnázium	1	⇒ 1.1 - 1.10

Příklad označení grafu s popisem - (1\*.1\*\*) - \* číslo testu, \*\* číslo položky

**TEST 1**

***Milá studentko, milý studente,***

předkládám Vám test, který je zaměřen na zkoumání problematiky zobrazování struktury chemických sloučenin. Mě, jako autora testu, Vaše odpovědi velmi zajímají. Možná si říkáte, k jakému účelu bude zpracování testu sloužit?

Chtěl bych, aby vaše vědomosti pomohly při tvorbě nových učebních pomůcek. Tyto učební pomůcky poslouží k názornější prezentaci struktury chemických sloučenin a pomohou studentům lépe pochopit fyzikální, chemické i biologické vlastnosti látek.

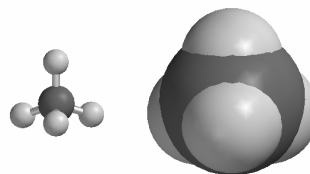
Pro Vaši informaci dodávám, že průzkum je anonymní a nemusíte se ho zúčastnit. Přiznávám však, že by mě potěšilo opačné rozhodnutí - testy vyplnit. Věřím, že Vaše osobní a nikým neovlivněné názory ve výsledku pomohou splnit cíle, které jsem si předsevzal.

***Děkuji Vám za spolupráci.***

Dr. Milan Marek

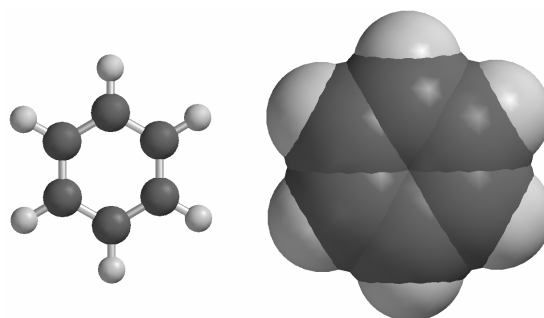
1. Na základě materiálních modelů popište distribuci elektronové hustoty v molekule methanu. Atom C přitahuje elektrony:

- a) méně než atom H
- b) více než atom H
- c) stejně jako atom H



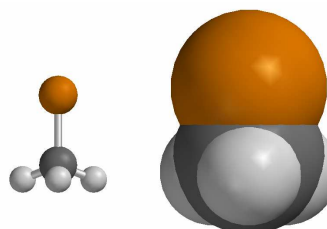
2. Nejznámější reakcí arenů je elektrofilní aromatická substituce. Při reakci benzenu s chlorem vzniká konečný produkt chlorbenzen. Atom chloru v molekule benzenu nahrazuje atom vodíku. S přihlédnutím k materiálním modelům molekuly benzenu rozhodněte zda se atom vodíku při reakci odštěpuje ve formě částice:

- a)  $H^+$
- b)  $H^-$
- c)  $H^\bullet$



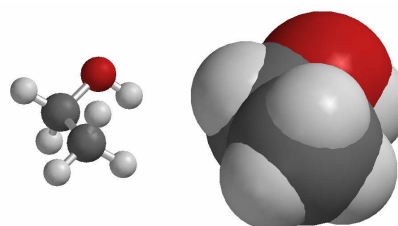
3. Pomocí materiálních modelů molekuly methylechloridu určete, jaká je polarita vazby C – Cl. Na atomu C je elektronová hustota:

- a) stejná jako na atomu Cl
- b) nižší než na atomu Cl
- c) vyšší než na atomu Cl



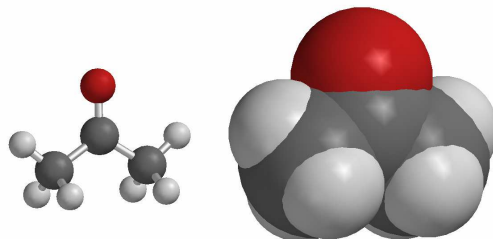
4. Reakcí ethanolu s kyselinou bromovodíkovou vzniká ethylbromid a voda. Pomocí studia materiálních modelů navrhněte, který atom molekuly ethanolu je při výše uvedené reakci primárně napadán částicí  $H^+$ :

- a) atom C, na kterém je vázána OH skupina
- b) atom H vázaný na atomu O
- c) atom O



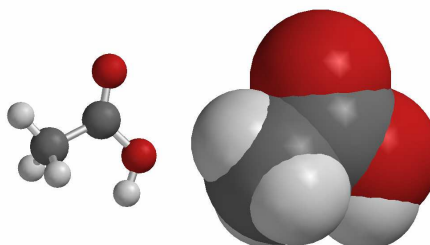
5. Aceton je sloučenina velmi dobře rozpustná ve vodě. Příčinou rozpustnosti jsou vodíkové vazby, které se tvoří mezi molekulami acetonu a vody. Na základě materiálních modelů rozhodněte, který atom molekuly acetonu se účastní vzniku vodíkové vazby při interakci s molekulou vody:

- a) atom H
- b) atom O
- c) atom C



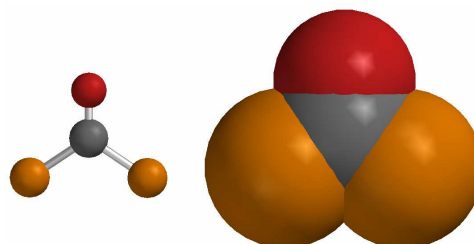
6. S využitím materiálních modelů molekuly kyseliny octové odhadněte, který atom vodíku se nejsnáze odštěpí jako částice  $H^+$ :

- a) atom H na atomu O
- b) atom H na atomu C
- c) žádný atom H



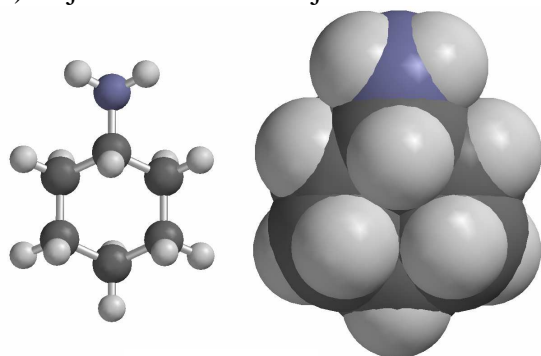
7. Molekula dichloridu kyseliny uhličité (fosgenu) je známa svojí extrémní reaktivitou vůči nukleofilním činidlům ( $H_2O$ ,  $NH_3$ ). Po seznámení se s materiálními modely molekuly fosgenu zdůvodněte jeho vysokou reaktivitu a to jako důsledek:

- a) nízké polarity vazby C – Cl
- b) vysoké polarity vazby C – Cl
- c) střední polarity vazby C – Cl

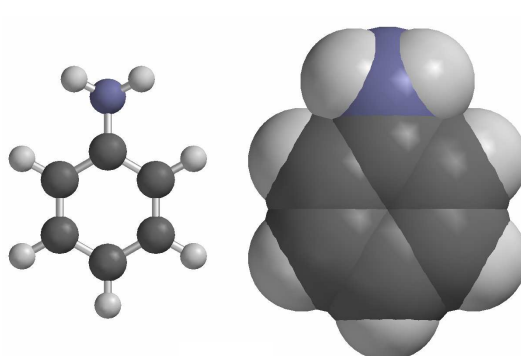


8. Porovnejte materiální modely molekul cyklohexylaminu a anilinu. Rozhodněte zda je cyklohexylamin:

- a) silnější zásadou než anilin
- b) slabší zásadou než anilin
- c) stejně silnou zásadou jako anilin



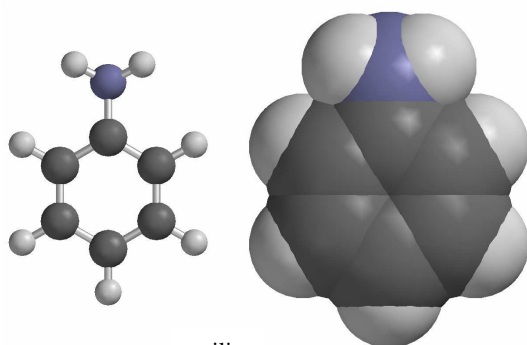
cyklohexylamin



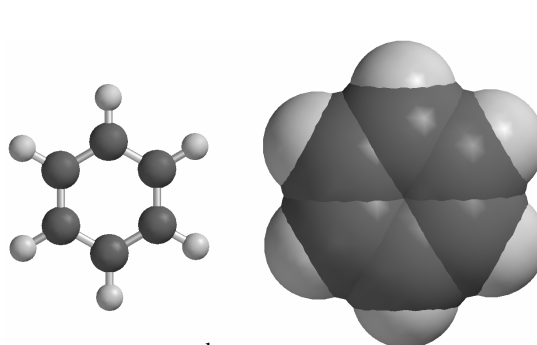
anilin

9. Na základě porovnání materiálních modelů molekul anilinu a benzenu určete, k jakým interakcím dochází mezi aminoskupinou a benzenovým jádrem. Určete zda aminoskupina v molekule anilinu:

- a) dodává elektrony benzenovému jádru
- b) odebírá elektrony benzenovému jádru
- c) nedodává ani neodebírá elektrony benzenovému jádru



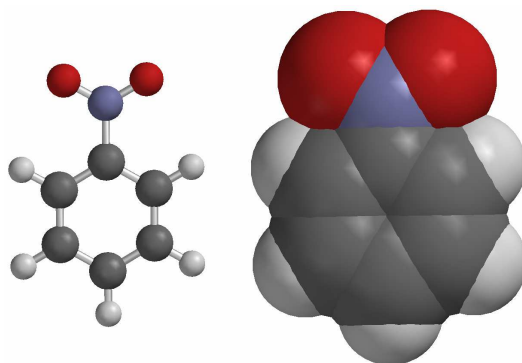
anilin



benzen

10. Při redukci nitrosloučeniny dochází ke změně nitroskupiny na aminoskupinu. Redukce se často provádí kovy. Atakujícím činidlem při redukci je elektron ( $e^-$ ). Po seznámení se s níže uvedenými materiálními modely rozhodněte, který atom nitroskupiny molekuly nitrobenzenu je napadán elektronem:

- a) atom O
- b) atom C
- c) atom N



**TEST 2**

<b>Fáze výzkumu</b>	<b>Typ školy</b>	<b>Označení testu (v této Příloze)</b>	<b>Označení grafu (v Příloze 10)</b>
Výzkum 2	Gymnázium	2	⇒ 2.1 - 2.10

Příklad označení grafu s popisem - (2\*.1\*\*) - \* číslo testu, \*\* číslo položky



**TEST 2**

***Milá studentko, milý studente,***

předkládám Vám test, který je zaměřen na zkoumání problematiky zobrazování struktury chemických sloučenin. Mě, jako autora testu, Vaše odpovědi velmi zajímají. Možná si říkáte, k jakému účelu bude zpracování testu sloužit?

Chtěl bych, aby vaše vědomosti pomohly při tvorbě nových učebních pomůcek. Tyto učební pomůcky poslouží k názornější prezentaci struktury chemických sloučenin a pomohou studentům lépe pochopit fyzikální, chemické i biologické vlastnosti látek.

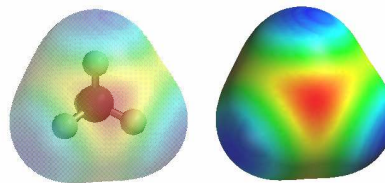
Pro Vaši informaci dodávám, že průzkum je anonymní a nemusíte se ho zúčastnit. Přiznávám však, že by mě potěšilo opačné rozhodnutí - testy vyplnit. Věřím, že Vaše osobní a nikým neovlivněné názory ve výsledku pomohou splnit cíle, které jsem si předsevzal.

***Děkuji Vám za spolupráci.***

Dr. Milan Marek

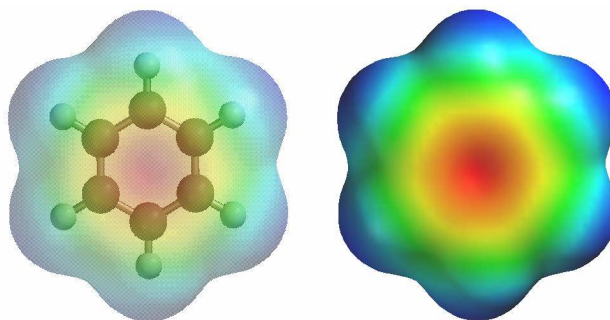
1. Na základě počítačových modelů popište distribuci elektronové hustoty v molekule methanu. Atom C přitahuje elektrony:

- a) méně než atom H
- b) více než atom H
- c) stejně jako atom H



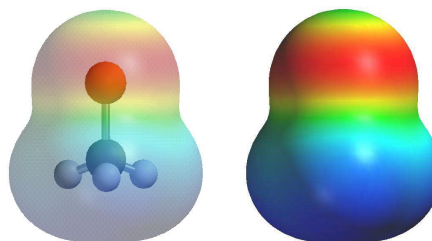
2. Nejznámější reakcí arenů je elektrofilní aromatická substituce. Při reakci benzenu s chlorem vzniká konečný produkt chlorbenzen. Atom chloru v molekule benzenu nahrazuje atom vodíku. S přihlédnutím k počítačovým modelům molekuly benzenu rozhodněte zda se atom vodíku při reakci odštěpuje ve formě částice:

- a)  $H^+$
- b)  $H^-$
- c)  $H^\bullet$



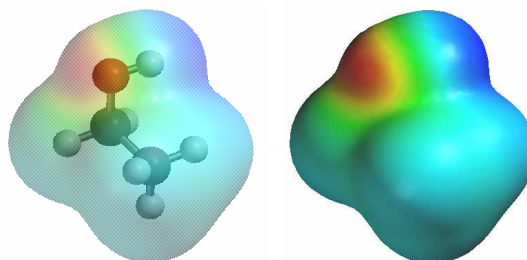
3. Pomocí počítačových modelů molekuly methylchloridu určete jaká je polarita vazby C – Cl. Na atomu C je elektronová hustota:

- a) stejná jako na atomu Cl
- b) nižší než na atomu Cl
- c) vyšší než na atomu Cl



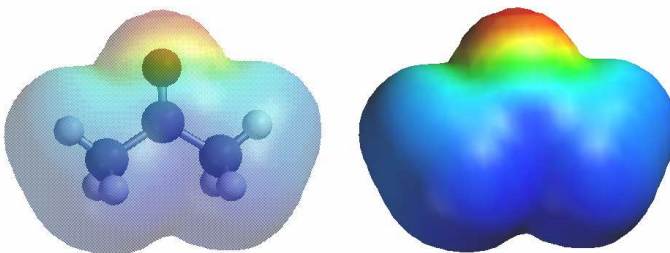
4. Reakcí ethanolu s kyselinou bromovodíkovou vzniká ethylbromid a voda. Pomocí studia počítačových modelů navrhnete, který atom molekuly ethanolu je při výše uvedené reakci primárně napadán částicí  $H^+$ :

- a) atom C, na kterém je vázána OH skupina
- b) atom H vázaný na atomu O
- c) atom O



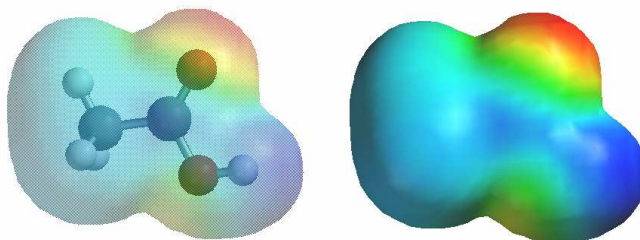
5. Aceton je sloučenina velmi dobře rozpustná ve vodě. Příčinou rozpustnosti jsou vodíkové vazby, které se tvoří mezi molekulami acetonu a vody. Na základě počítačových modelů rozhodněte, který atom molekuly acetonu se účastní vzniku vodíkové vazby při interakci s molekulou vody:

- a) atom H
- b) atom O
- c) atom C



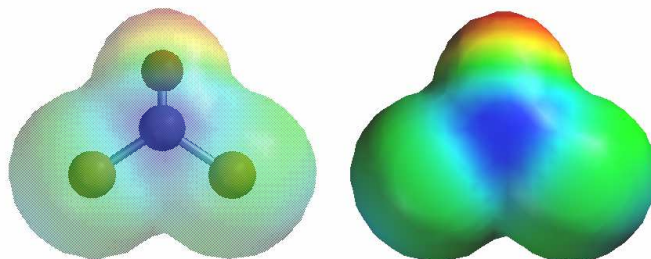
6. S využitím počítačových modelů molekuly kyseliny octové odhadněte, který atom vodíku se nejspíše odštěpí jako částice  $H^+$ :

- a) atom H na atomu O
- b) atom H na atomu C
- c) žádný atom H



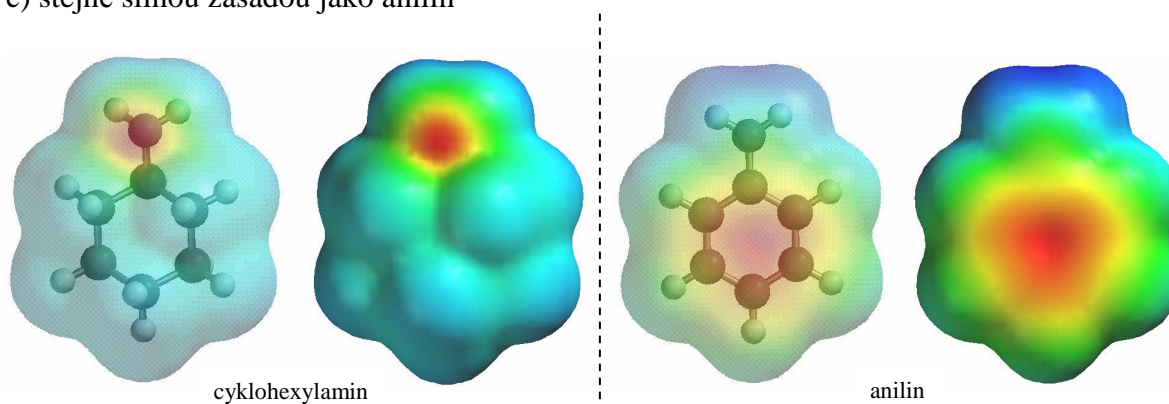
7. Molekula dichloridu kyseliny uhličité (fosgenu) je známa svojí extrémní reaktivitou vůči nukleofilním činidlům ( $H_2O$ ,  $NH_3$ ). Po seznámení se s počítačovými modely molekuly fosgenu zdůvodněte jeho vysokou reaktivitu a to jako důsledek:

- a) nízké polarity vazby C – Cl
- b) vysoké polarity vazby C – Cl
- c) střední polarity vazby C – Cl



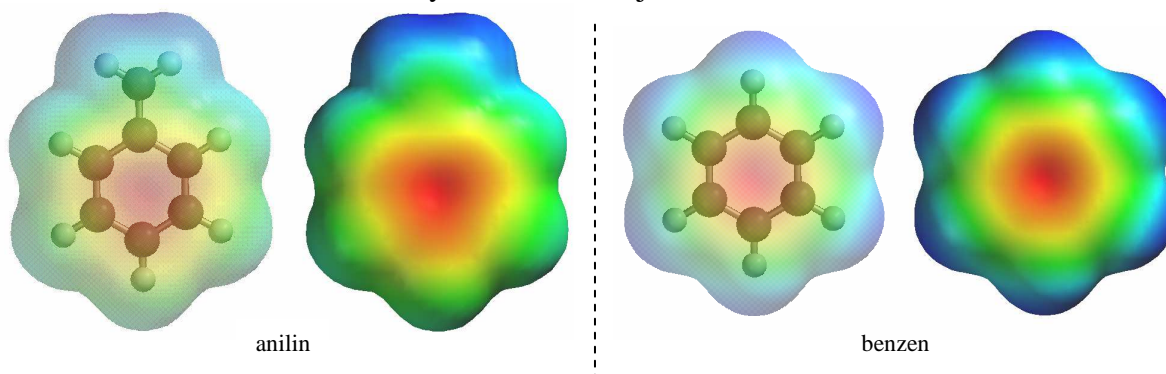
8. Porovnejte počítačové modely molekul cyklohexylaminu a anilinu. Rozhodněte zda je cyklohexylamin:

- a) silnější zásadou než anilin
- b) slabší zásadou než anilin
- c) stejně silnou zásadou jako anilin



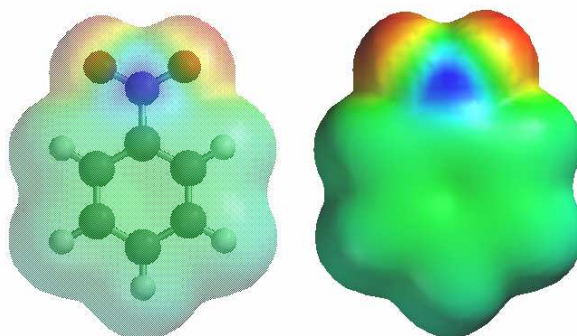
9. Na základě porovnání počítačových modelů molekul anilinu a benzenu určete, k jakým interakcím dochází mezi aminoskupinou a benzenovým jádrem. Aminoskupina v molekule anilinu:

- a) dodává elektrony benzenovému jádru
- b) odebírá elektrony benzenovému jádru
- c) nedodává ani neodebírání elektrony benzenovému jádru



10. Při redukci nitrosloučeniny dochází ke změně nitroskupiny na aminoskupinu. Redukce se často provádí kovy. Atakujícím činidlem při redukci je elektron ( $e^-$ ). Po seznámení se s níže uvedenými počítačovými modely rozhodněte, který atom nitroskupiny molekuly nitrobenzenu je napadán elektronem:

- a) atom O
- b) atom C
- c) atom N

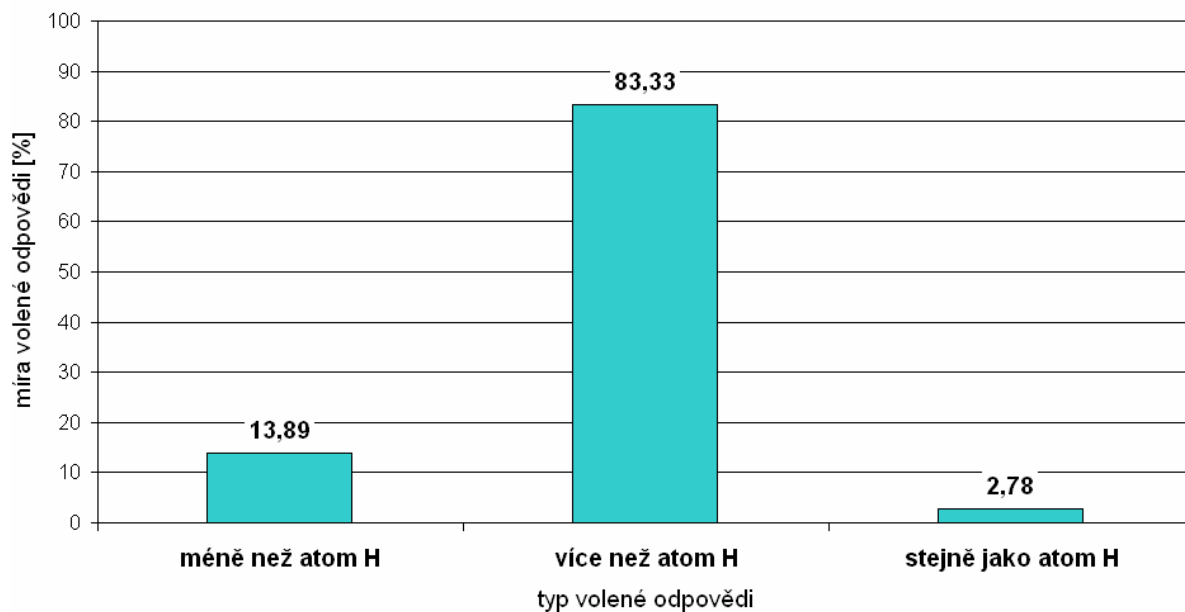


**GRAFY - TEST 1**

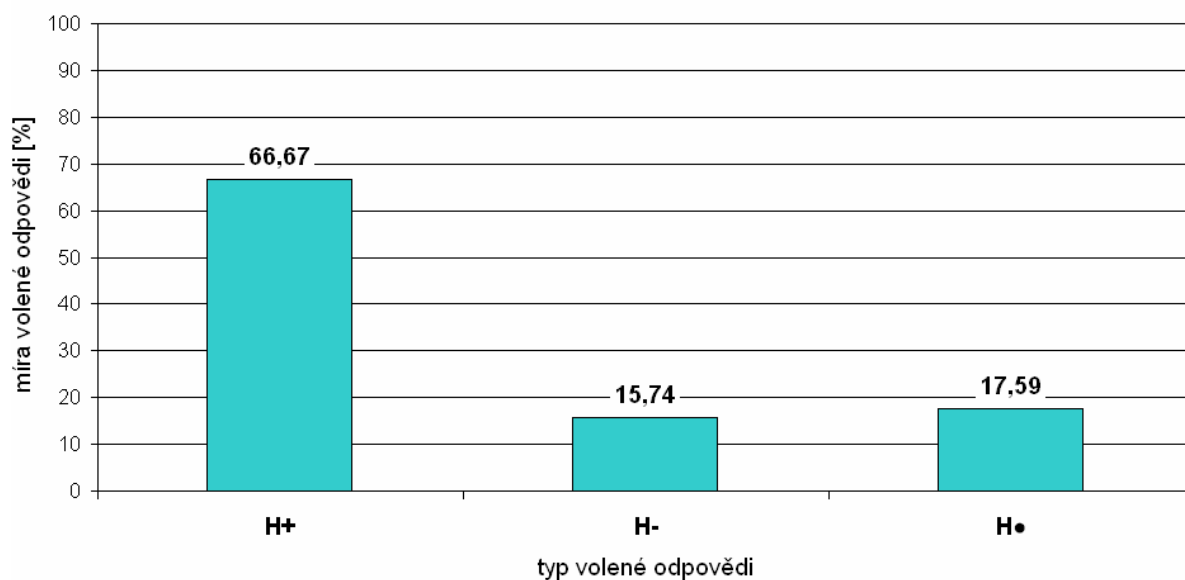
<b>Fáze výzkumu</b>	<b>Typ školy</b>	<b>Označení grafu (v této Příloze)</b>	<b>Označení testu (v Příloze 7)</b>
Výzkum 1	Gymnázium	1.1 - 1.10	⇒ 1

Příklad označení grafu s popisem - (1\*.1\*\*) - \* číslo testu, \*\* číslo položky

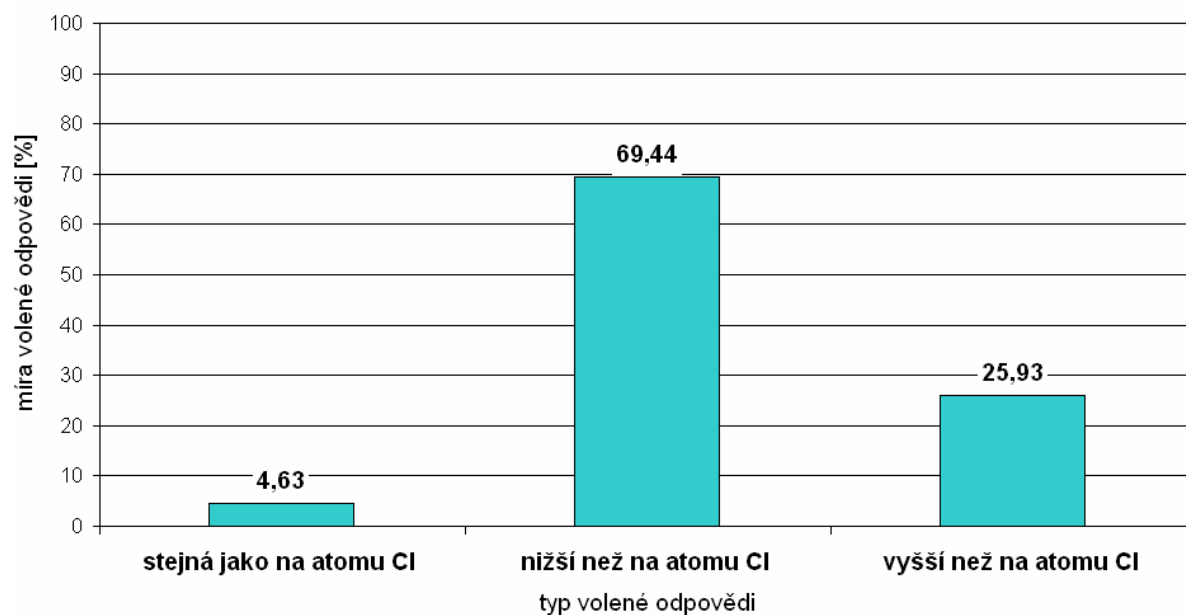
**1.1. Na základě materiálních modelů popište distribuci elektronové hustoty v molekule methanu. Atom C přitahuje elektrony:**



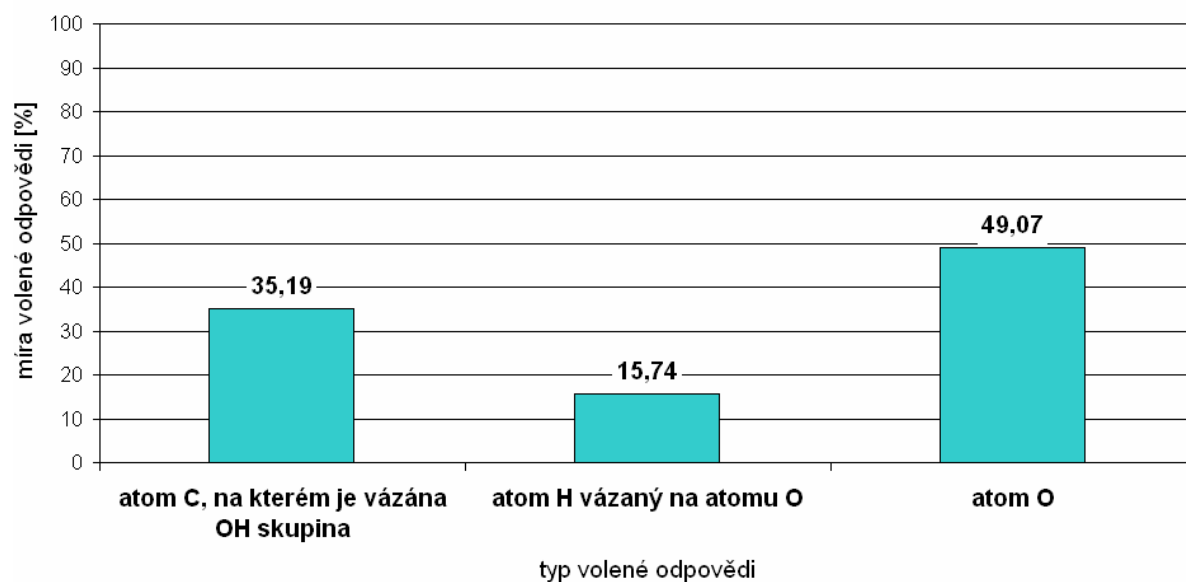
**1.2. Nejznámější reakcí arenů je elektrofilní aromatická substituce. S přihlédnutím k materiálním modelům molekuly benzenu rozhodněte zda se atom H při reakci odštěpuje ve formě částice:**



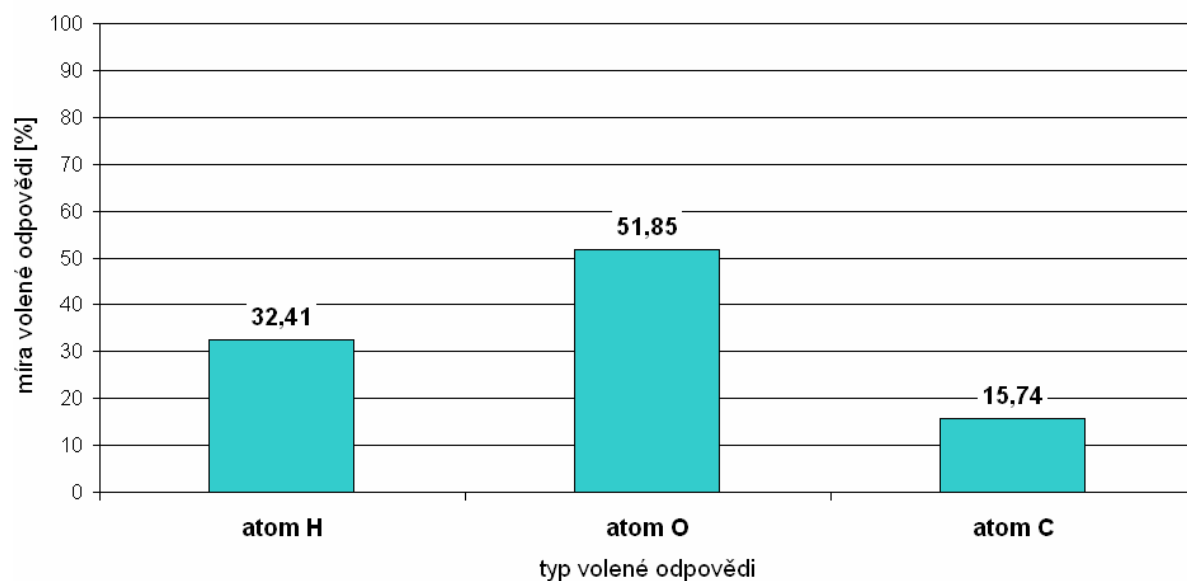
**1.3. Pomocí materiálních modelů molekuly methylchloridu určete, jaká je polarita vazby C – Cl. Na atomu C je elektronová hustota:**



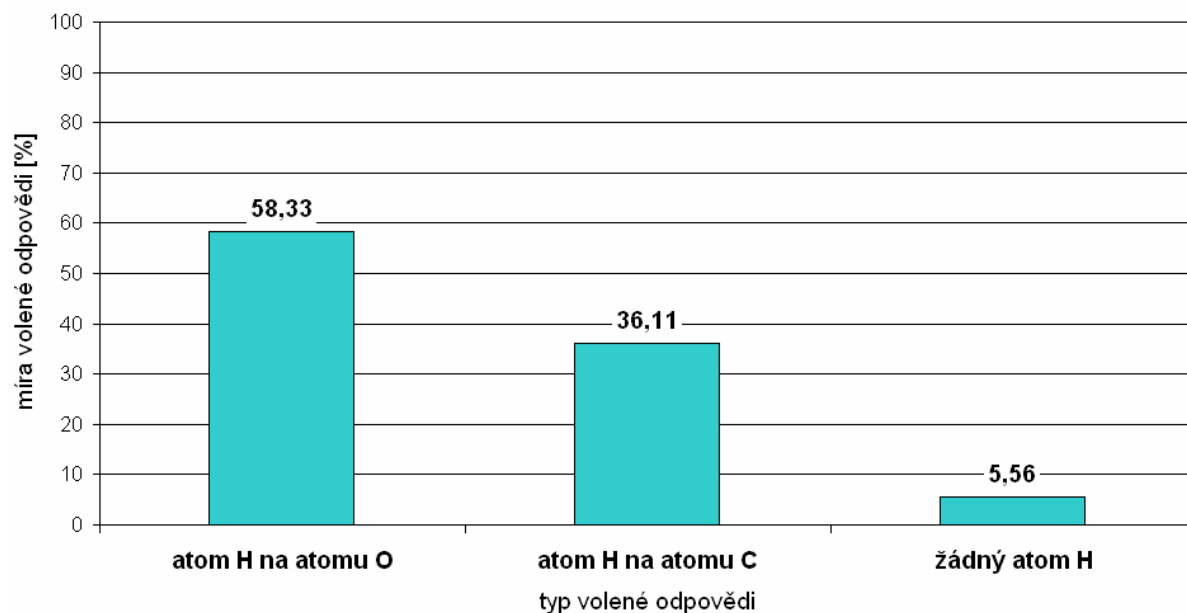
**1.4. Reakcí ethanolu s kyselinou bromovodíkovou vzniká ethylbromid a voda. Pomocí studia materiálních modelů navrhnete, který atom molekuly ethanolu je při výše uvedené reakci primárně napadán částicí H<sup>+</sup>:**



**1.5. Aceton je sloučenina velmi dobře rozpustná ve vodě. Na základě materiálních modelů rozhodněte, který atom molekuly acetonu se účastní vzniku vodíkové vazby při interakci s molekulou vody:**

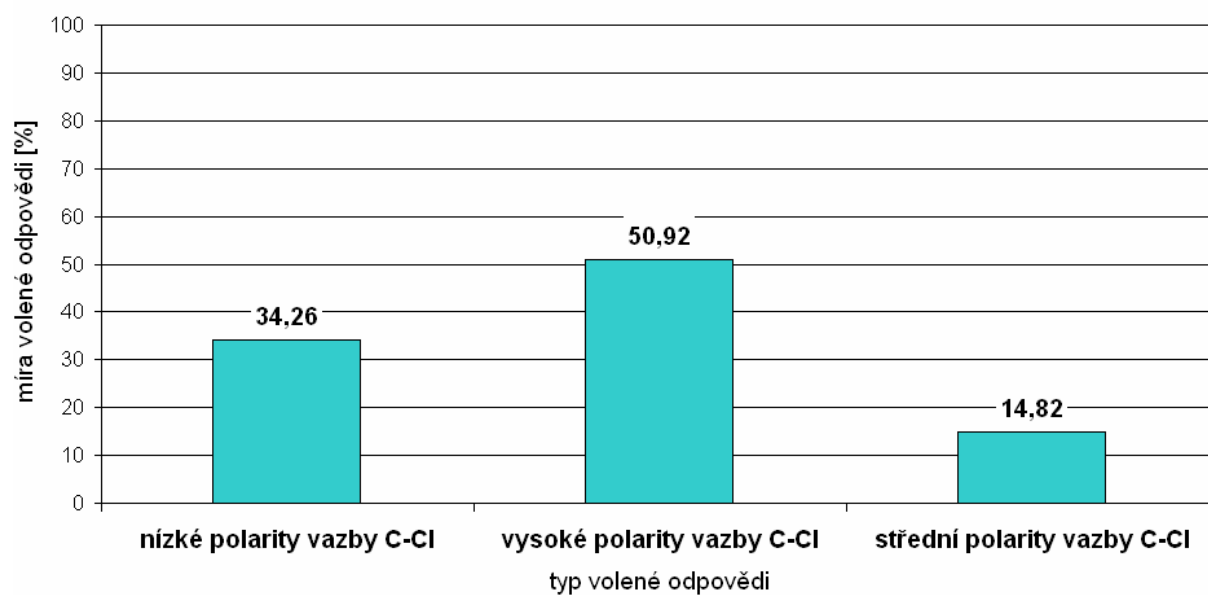


**1.6. S využitím materiálních modelů molekuly kyseliny octové odhadněte, který atom vodíku se nejnáze odštěpí jako částice H<sup>+</sup>:**

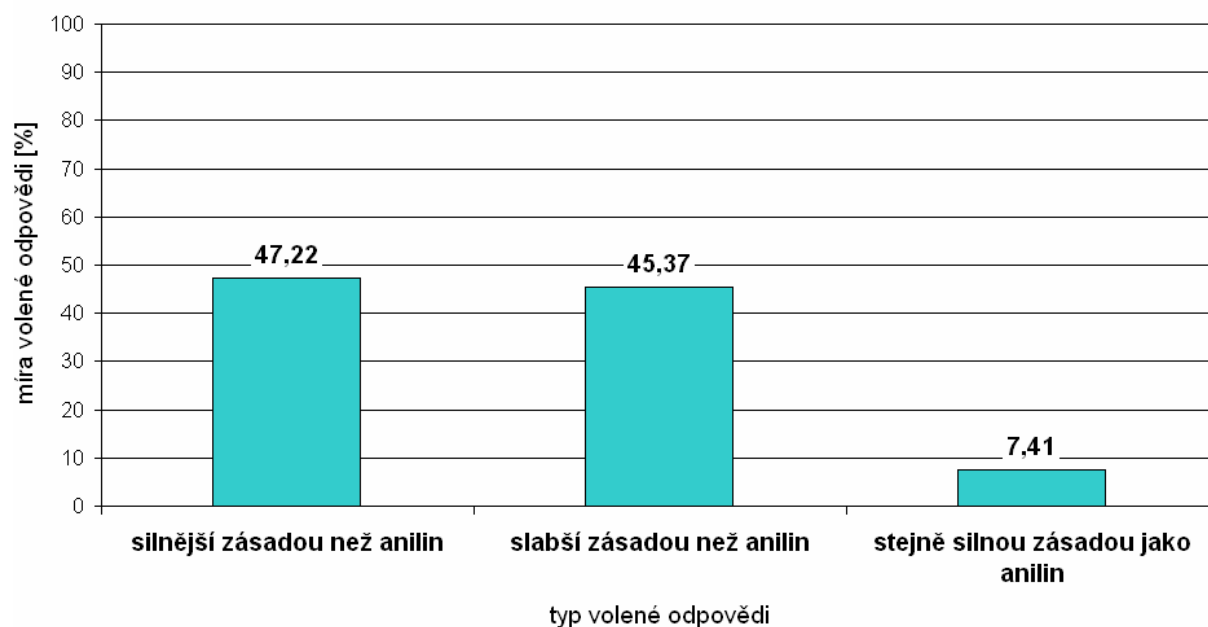




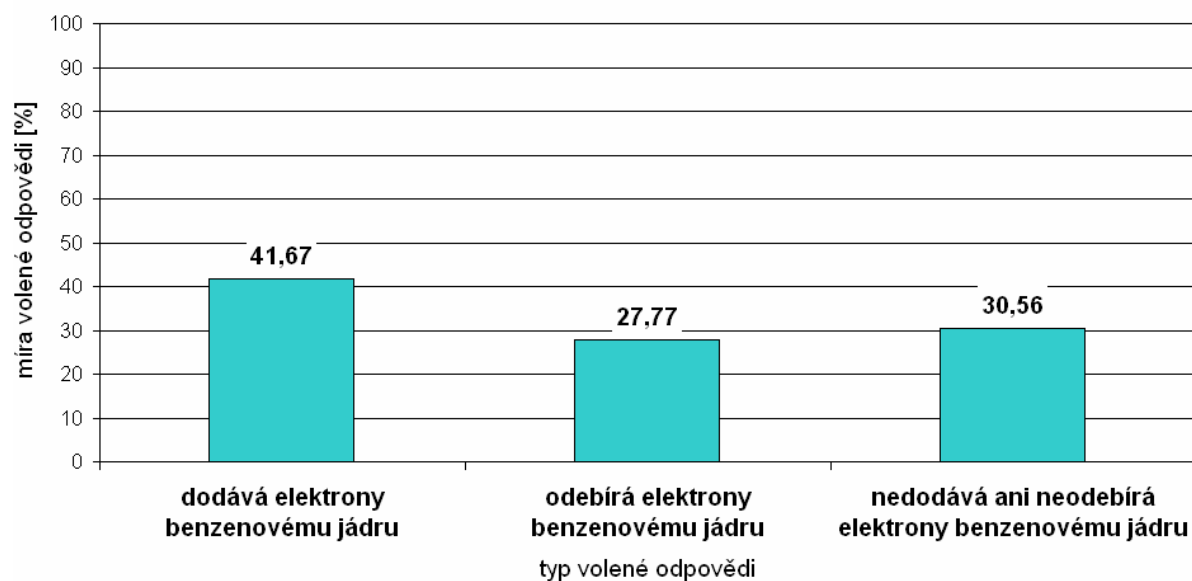
**1.7. Molekula dichloridu kyseliny uhličité je známa svou extrémní reaktivitou vůči nukleofilním činidlům. Po seznámení se s materiálními modely molekuly fosgeny zdůvodněte jeho vysokou reaktivitu a to jako důsledek:**



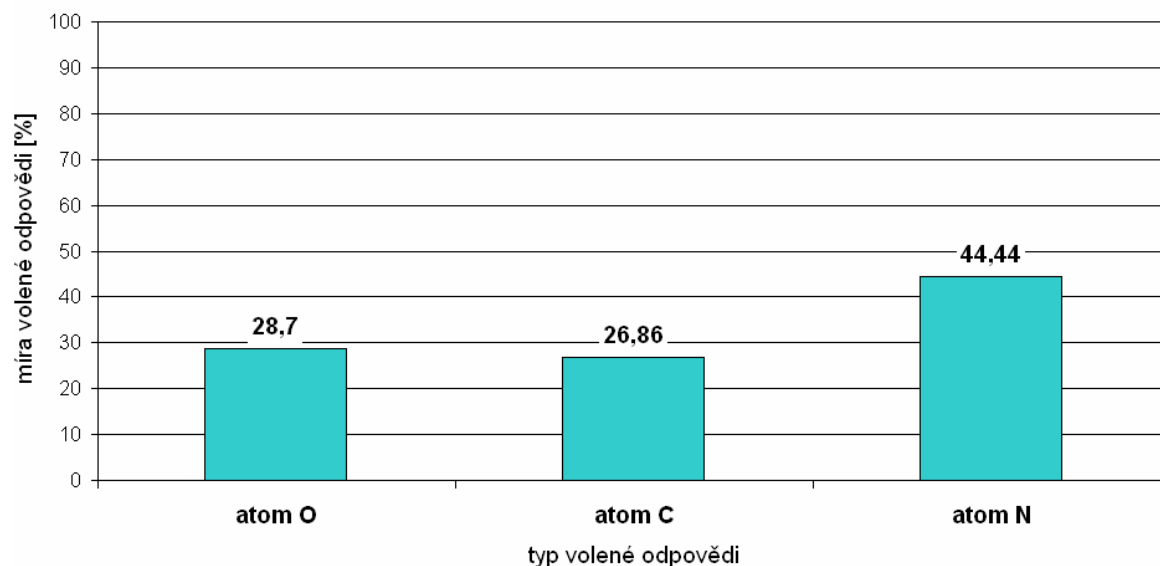
**1.8. Porovnejte materiální modely molekul cyklohexylaminu a anilinu. Rozhodněte zda je cyklohexylamin:**



**1.9. Na základě porovnání materiálních modelů molekul anilinu a benzenu určete, k jakým interakcím dochází mezi aminoskupinou a benzenovým jádrem. Určete zda aminoskupina v molekule anilinu:**



**1.10. Při redukci nitrosloučeniny dochází ke změně nitroskupiny na aminoskupinu. Po seznámení se s níže uvedenými materiálními modely rozhodněte, který atom nitroskupiny molekuly nitrobenzenu je napadán e- :**

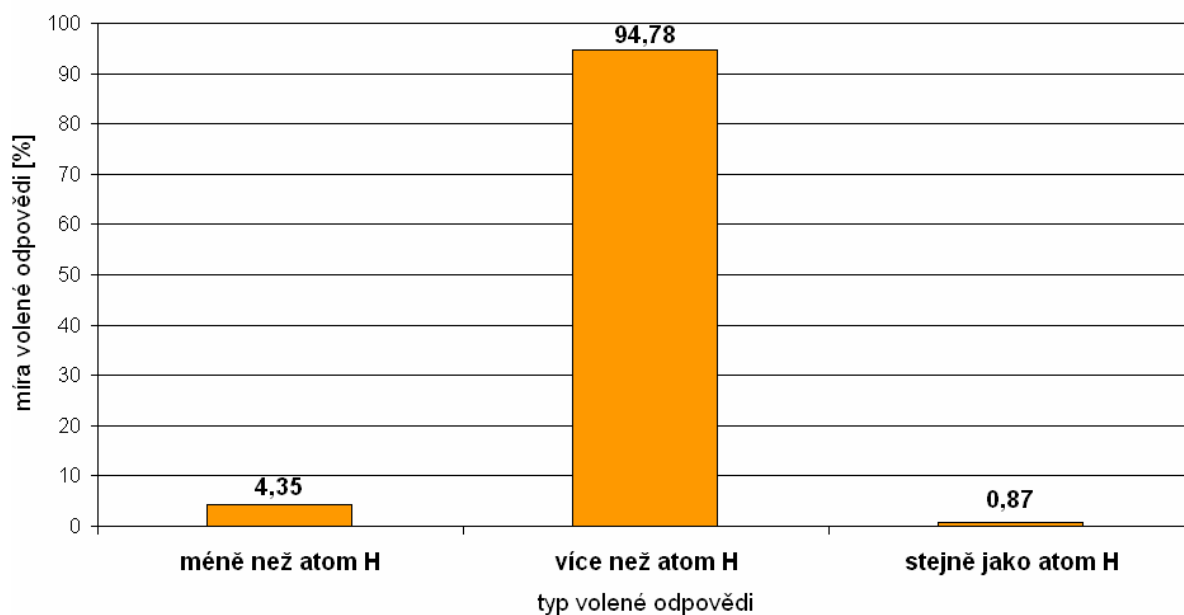


**GRAFY - TEST 2**

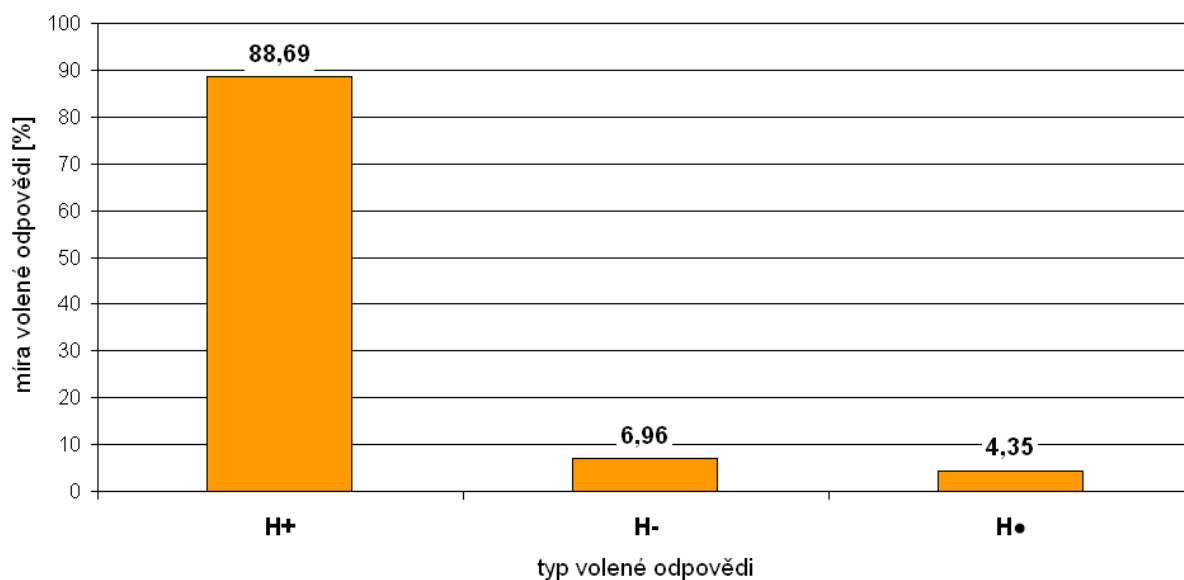
<b>Fáze výzkumu</b>	<b>Typ školy</b>	<b>Označení grafu (v této Příloze)</b>	<b>Označení testu (v Příloze 8)</b>
Výzkum 2	Gymnázium	2.1 - 2.10	⇒ 2

Příklad označení grafu s popisem - (2\*.1\*\*) - \* číslo testu, \*\* číslo položky

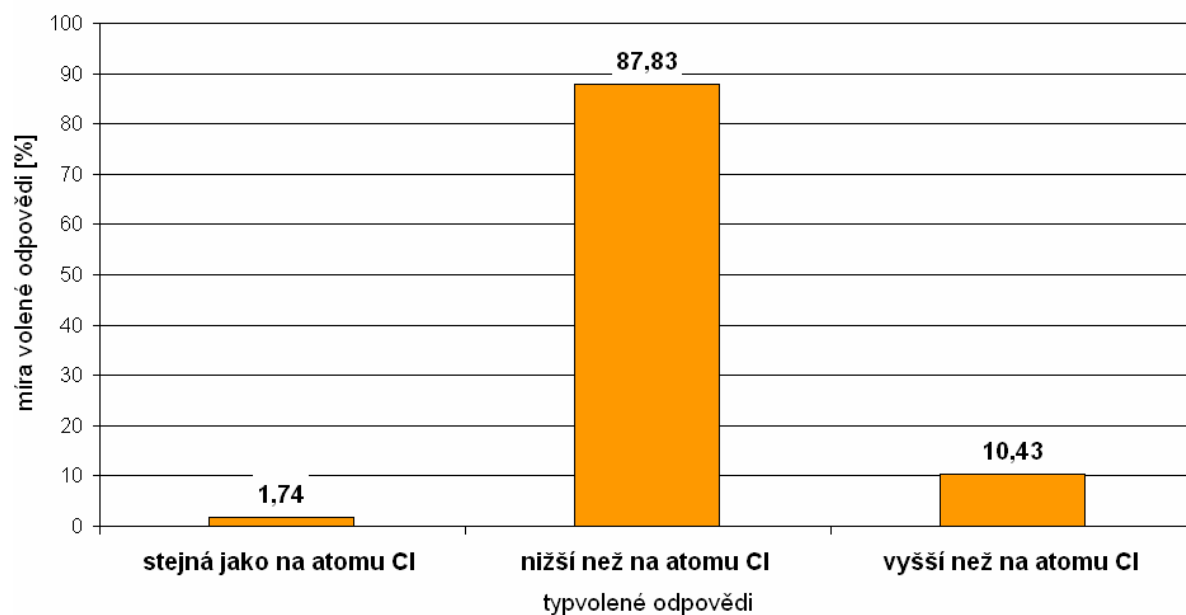
**2.1. Na základě počítačových modelů popište distribuci elektronové hustoty v molekule methanu. Atom C přitahuje elektrony:**



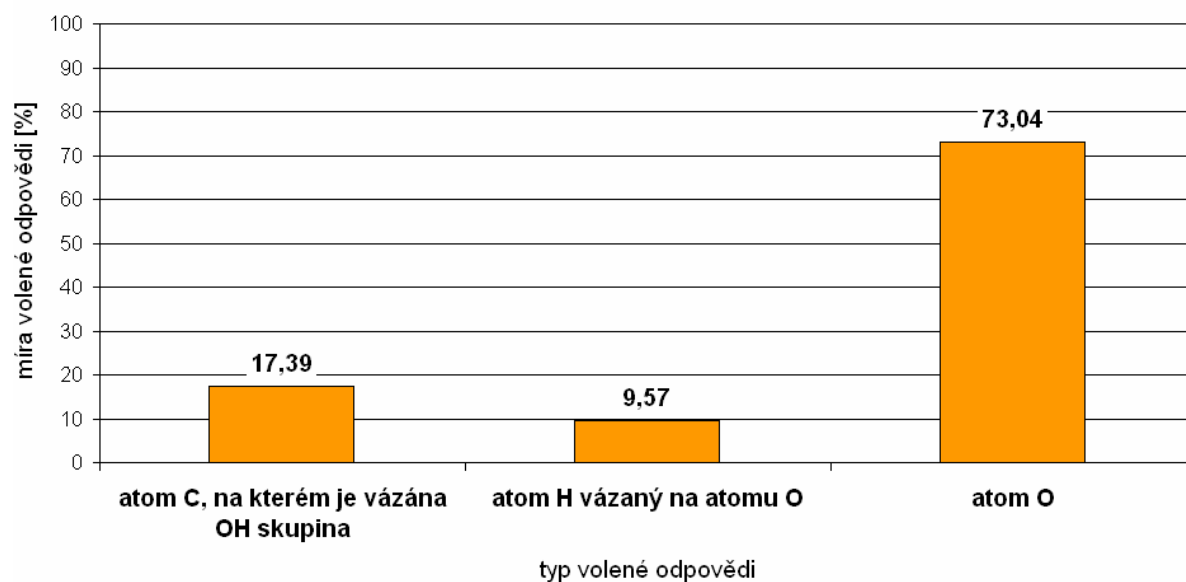
**2.2. Nejznámější reakcí arenů je elektrofilní aromatická substituce. S přihlédnutím k počítačovým modelům molekuly benzenu rozhodněte zda se atom vodíku při reakci odštěpuje ve formě částice:**



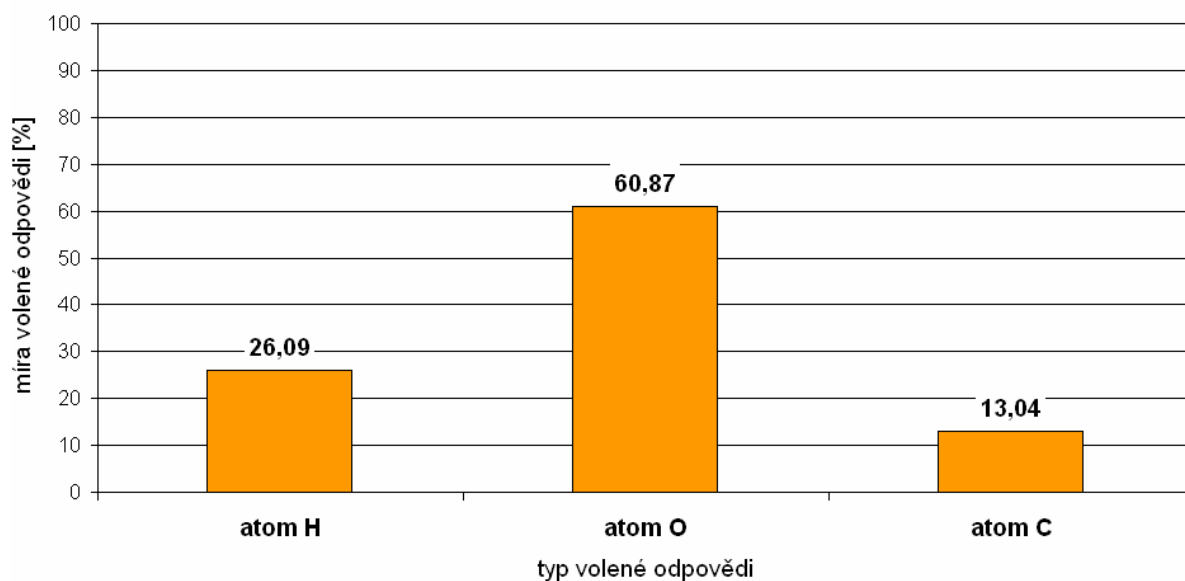
**2.3. Pomocí počítačových modelů molekuly methylchloridu určete jaká je polarita vazby C – Cl. Na atomu C je elektronová hustota:**



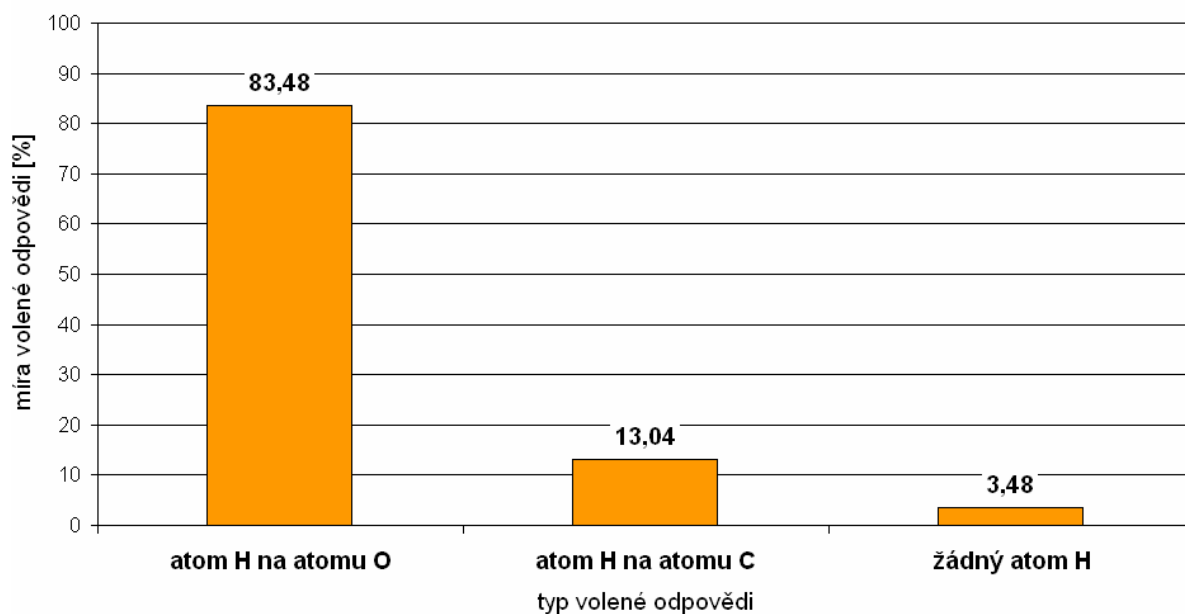
**2.4. Reakcí ethanolu s kyselinou bromovodíkovou vzniká ethylbromid a voda. Pomocí studia počítačových modelů navrhněte, který atom molekuly ethanolu je při výše uvedené reakci primárně napadán částicí H<sup>+</sup>:**



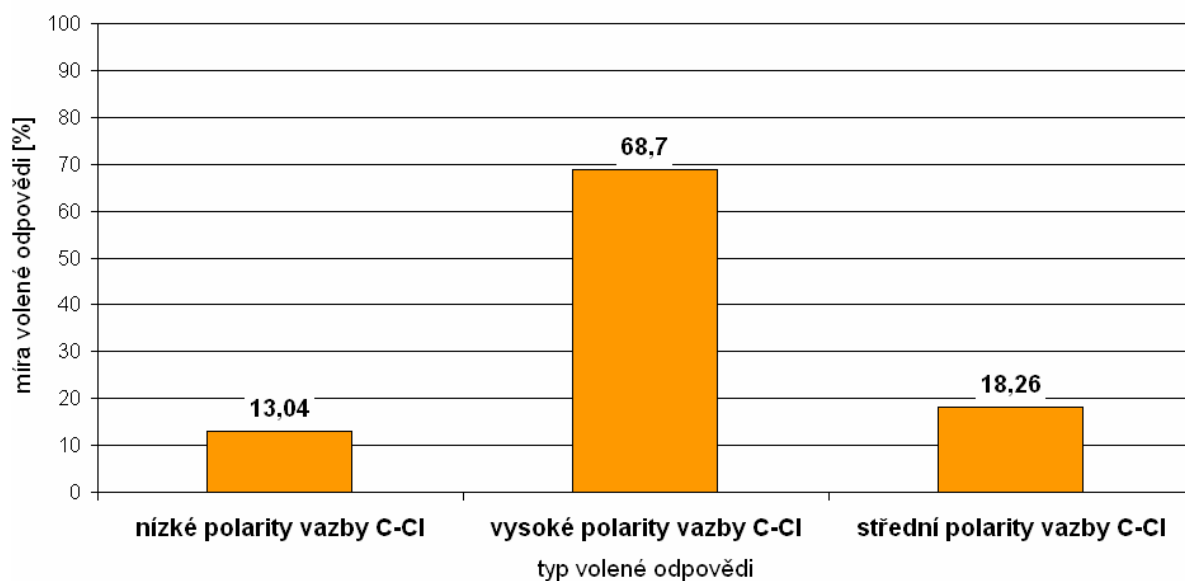
**2.5. Aceton je sloučenina velmi dobře rozpustná ve vodě. Na základě počítačových modelů rozhodněte, který atom molekuly acetonu se účastní vzniku vodíkové vazby při interakci s molekulou vody:**



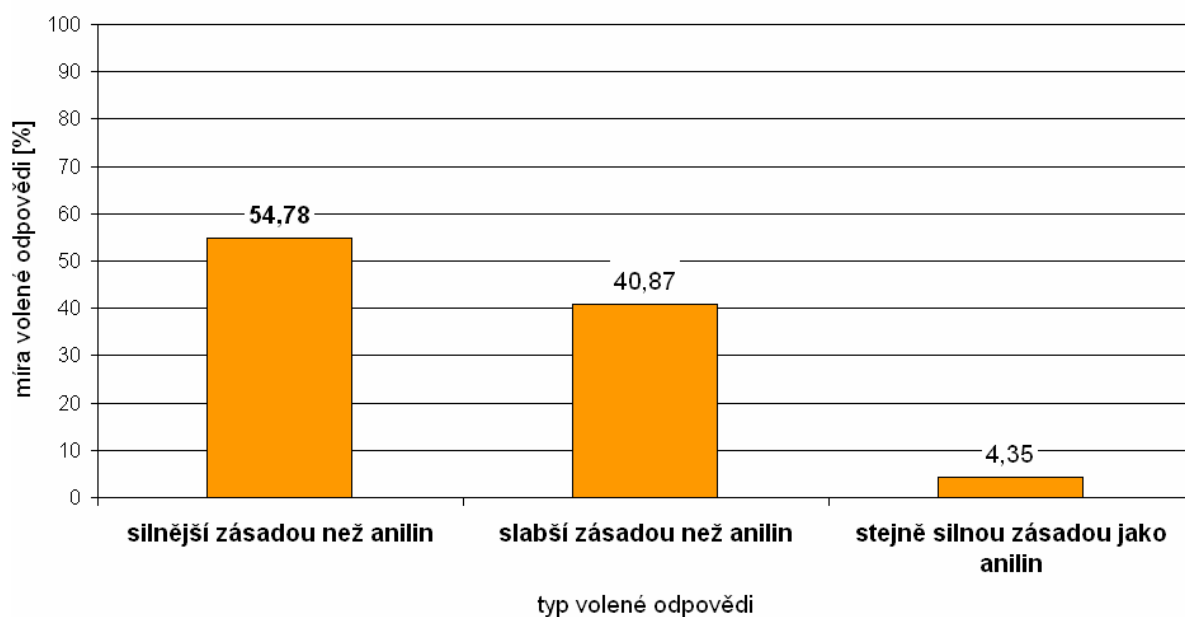
**2.6. S využitím počítačových modelů molekuly kyseliny octové odhadněte, který atom vodíku se nejnáze odštěpí jako částice H<sup>+</sup>:**



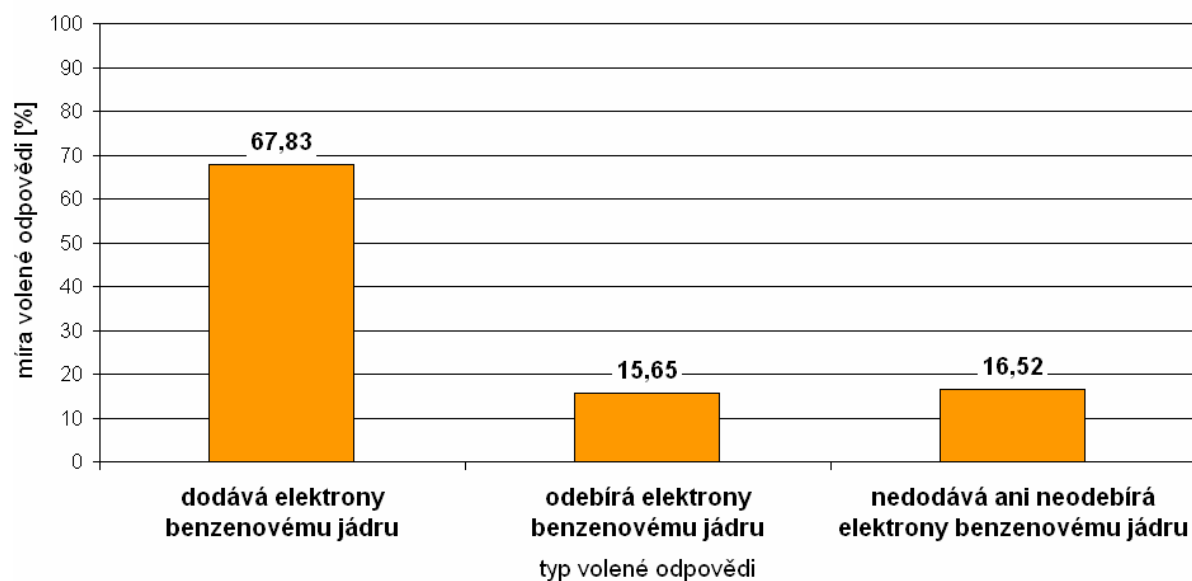
**2.7. Molekula dichloridu kyseliny uhličité je známa svou extrémní reaktivitou vůči nukleofilním činidlům. Po seznámení se s počítačovými modely molekuly fosgeny zdůvodněte jeho vysokou reaktivitu a to jako důsledek:**



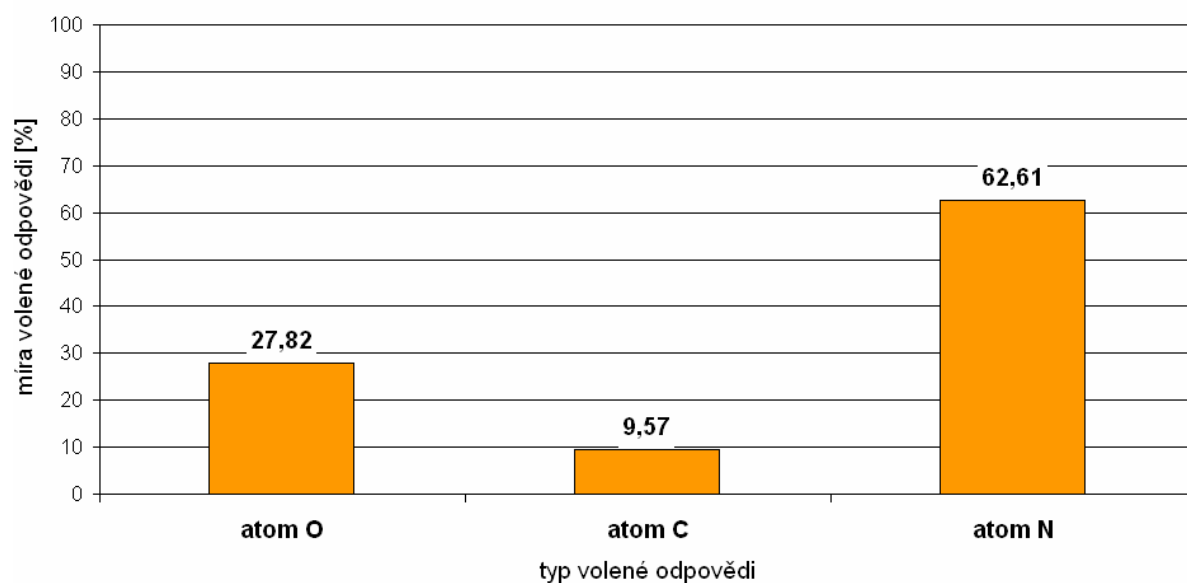
**2.8. Porovnejte počítačové modely molekul cyklohexylaminu a anilinu. Rozhodněte zda je cyklohexylamin:**



**2.9. Na základě porovnání počítačových modelů molekul anilinu a benzenu určete, k jakým interakcím dochází mezi aminoskupinou a benzenovým jádrem. Aminoskupina v molekule anilinu:**



**2.10. Při redukci nitrosloučeniny dochází ke změně nitroskupiny na aminoskupinu. Po seznámení se s níže uvedenými počítačovými modely rozhodněte, který atom nitroskupiny molekuly nitrobenzenu je napadán  $e^-$  :**







Rektorka Univerzity Hradec Králové

uděluje

v rámci veletrhu Odborná kniha Hradec Králové 2007

cenu **Počín roku**

**Karlu Kolářovi, Karlu Myškovi,  
Rafaelu Doležalovi a Milanu Markovi**

za vysokoškolský učební text

**Počítačové modely ve výuce chemie**

vydanou nakladatelstvím Gaudeamus  
v Hradci Králové v roce 2006.

V Hradci Králové 5. dubna 2007

  
doc. RNDr. Jaroslava Mikulecká, CSc.